

EL MÉTODO MONTE CARLO EN FÍSICA MÉDICA

Mauro Valente^{†*}

[†] CONICET & Universidad Nacional de Córdoba; Argentina

[†] CFIM & Dpto. Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera: Chile.

Primer semestre año académico 2024



Magíster en Física Médica
Universidad de La Frontera

*Contacto e-mail: mauro.valente@gmail.com || mauro.valente@ufrontera.cl

Prefacio

El presente trabajo *El método Monte Carlo en física médica* es un compendio original de notas elaborado por Mauro Valente en 2024, basado en las ediciones previas de 2017, 2018, 2020, 2021, 2022 y 2023 para ser utilizado como material de estudio y referencia para el curso electivo de especialización de post-grado *EL MÉTODO MONTE CARLO EN FÍSICA MÉDICA* en el ámbito del Magíster en Física Médica en la Universidad de La Frontera, y como asignatura electiva del programa de Ingeniería Civil Física en la Universidad de La Frontera; Chile.

El contenido del libro de notas está dedicado a formalismos y metodologías para áreas de aplicación que puedan aprovechar técnicas de modelado computacional por métodos Monte Carlo, específicamente basados en transporte y colisión de radiaciones.

Se incluye breves repases sobre elementos básicos de interacción de radiación con la materia, tanto a nivel atómico como nuclear incorporando descripciones de procesos físicos y modelos de algunos mecanismos de interacción de interés para física aplicada.

Programa y contenido

MÓDULO INICIAL: Rudimentos de FORTRAN77

1. Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77.
2. Ejercitación sencilla de aplicación.

MÓDULO I: Introducción a los Métodos de Monte Carlo

1. Introducción histórica y esquema general de la técnica Monte Carlo.
2. Conceptos básicos de la técnica Monte Carlo.

MÓDULO II: Repaso sobre estadística y conteo

1. Repaso sobre teoría de distribuciones.
2. Números aleatorios y pseudo-aleatorios.
3. Variables aleatorias independientes de distribuciones continuas y discretas.

MÓDULO III: Transporte de radiación ionizante

1. La ecuación de transporte de radiación de Boltzmann.
2. Formulación del principio.
3. Interpretación física en transporte de radiación.

MÓDULO IV: Cálculo de volúmenes e integrales con técnica Monte Carlo

1. Introducción.
2. Ejercicios de aplicación.
3. Comparación con otros métodos clásicos para integración en múltiples variables.

MÓDULO V: Técnicas de reducción de varianzas y eficiencia computacional.

1. Intervalos de confianza simultáneos.
2. Estimación de cocientes.
3. Estimación secuencial.

MÓDULO VI: Simulación Monte Carlo en física médica

1. Ejemplos.
2. Paquetes de simulación Monte Carlo en física médica.
3. El código PENELOPE.
4. Rudimentos básicos sobre el código FLUKA.
5. Distribuciones de dosis en profundidad.
6. Simulación de equipamiento médico de radiología.
7. Simulación de procedimientos de medicina nuclear.
8. Simulación de procesos avanzados y técnicas complejas

TRABAJOS PRÁCTICOS ESPECIALES Y ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA

El presente curso incluye la realización de trabajos prácticos de laboratorio informático. Las actividades prácticas de laboratorio se refieren a la ejercitación computacional, según el siguiente esquema:

- Práctico preliminar: Rutinas básicas en FORTRAN 77
- Práctico I: Elaboración de rutinas de simulación Monte Carlo básica en MATLAB: Estimación de π
- Práctico II: Elaboración de rutinas de simulación Monte Carlo básica en MATLAB: Estimación de integrales definidas.
- Práctico III: Adaptación de rutinas de simulación Monte Carlo del código PENELOPE: Simulación en radiología.
- Práctico IV: Adaptación de rutinas de simulación Monte Carlo del código PENELOPE: Simulación en medicina nuclear.
- Práctico V: Adaptación de rutinas de simulación Monte Carlo del código PENELOPE: Simulación en radio-protección.
- Práctico VI: Adaptación de rutinas de simulación Monte Carlo del código PENELOPE: Simulación en radioterapia convencional.
- Práctico VII: Adaptación de rutinas de simulación Monte Carlo del código PENELOPE: Simulación en protonterapia.

OVJETIVOS Y METODOLOGÍA DEL TRABAJO

OBJETIVOS

Objetivos generales: Formar a los estudiantes en el área de la técnica Monte Carlo, con aplicaciones en física médica, desarrollando los fundamentos basales de la técnica y su implementación como metodología para la resolución numérica en el cálculo, particularmente de estimación de integrales en las ecuaciones de transporte de radiación de Boltzmann en problemas de física médica.

Objetivos específicos:

- Proporcionar al estudiante los conceptos teóricos relevantes de la técnica Monte Carlo.
- Proporcionar al estudiante las herramientas prácticas para diseñar e implementar rutinas básicas de simulación Monte Carlo para la resolución de problemas de cálculo numérico.
- Proporcionar al estudiante conocimientos y experiencia para adaptar rutinas de códigos Monte Carlo de transporte de radiación para aplicaciones en física médica.

METODOLOGÍA DEL TRABAJO

■ CLASES TEÓRICAS

Se realizarán clases teóricas en aula, o remotas según el contexto y la planificación de cada edición, con una carga semanal de 4 (cuatro) horas. Se tomará asistencia durante las clases teóricas.

■ CLASES DE EJERCITACIÓN PRÁCTICA

Se realizarán prácticos de ejercicios en aula, o remotas según el contexto y la planificación de cada edición, en base al contenido de las clases teóricas, con una carga horaria de 2 (dos) horas semanales, más tiempo de estudio y ejercitación por parte del estudiante.

- **TRABAJOS PRÁCTICOS Y DE LABORATORIO**

Se realizarán trabajos en laboratorio de informática, supervisada por el docente, con una carga horaria de 2 (dos) horas semanales. Los trabajos de laboratorio son obligatorios en momento y lugar que se determinen.

- **CLASES DE CONSULTA**

El docente dispondrá de 2 (dos) horas semanales extra, en modalidad y horario a convenir con los alumnos, para recibir consultas o profundizar temáticas de interés de los alumnos. El horario de consulta a disposición de los alumnos será sin obligación de asistencia.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA SUGERIDA

La asignatura contará con bibliografía específica, desarrollada originalmente por el docente para este curso. Además de la lista de artículos científicos que el docente proveerá a lo largo del curso, se recomienda la siguiente lista de bibliografía:

1. J. García Quesada. *Manual de Fortran 77*.
2. Valente M. *Elementos de cálculo dosimétrico para hadronterapia y campos mixtos* Notas del curso de posgrado en FaMAF 2010-2012-2013-2014-2015. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
3. Valente M. *Fundamentos de física médica* Notas del curso de grado en FaMAF 2016. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
4. Binder, K. *The Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer-Verlag, 1979.
5. F. Salvat et al. *PENELOPE, an algorithm and computing code for Monte Carlo simulation of electron photon showers* Ed. NEA, 2008.
6. Binder, K. and Heermann D. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer-Verlag, 1988.
7. Crank, J. *Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, 1990.
8. M. Valente y P. Perez. *Dosimetría y radiobiología* Notas para curso de grado, Universidad de Catamarca., 2011. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
9. Kahn F. *The physics of the radiation therapy* 3th ed, Lippincott Williams & Wil, 2003.
10. Knoll G. *Radiation detection and measurements* 3rd ed, John Wiley & Sons, 1999.
11. Cherry S. et al. *Physics in nuclear medicine* 3th ed, Saunders, 2003
12. F. Attix. *Introduction to radiological physics and radiation dosimetry* Ed. John Wiley and Sons, 1986.
13. M. Valente *Física nuclear con aplicaciones* Notas del curso de especialidad en FaMAF 2008. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/valente>)
14. Duderstadt, J. and Martin W. *Transport Theory*, John Wiley & Sons, 1979.
15. Tain, S. *Monte Carlo Simulations of Disordered Systems*, World Scientific, Singapore, 1992.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. *Fricke gel dosimeter with improved sensitivity for low-dose-level measurements.* Valente M., Molina W., Carrizales Silva L., Figueroa R., Malano F., Pérez P., Santibáñez M & Vedelago J. *Journal of Applied Clinical Medical Physics* **17**(4) pp. 402-417, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
2. *Neutron dose estimation in a zero power nuclear reactor.* Triviño S., Vedelago J., Cantargi F., Keil W., Figueroa R., Mattea F., Chautemps A., Santibáñez, M & Valente M. *Radiation Physics and Chemistry* **127** pp. 62-67, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
3. *Fricke and polymer gel 2D dosimetry validation using Monte Carlo simulation.* Vedelago J., Obando D.C., Malano F., Conejeros R., Figueroa R., García D., González G., Romero M., Santibáñez M., Strumia M.C., Velásquez J., Mattea F. & Valente. *Radiation Measurements* **91** pp. 54-64, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
4. *Analytical and rheological studies of modified gel dosimeters exposed to X-ray beams.* Romero M., Mattea F., Vedelago J., Chacón D., Valente M., Igarzábal Álvarez C. & Strumia M. *Microchemical Journal* **127** pp. 231-236, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
5. *Evaluation of EDXRF configurations to improve the limit of detection and exposure for in vivo quantification of gadolinium in tumor tissue.* Santibáñez, M., Vásquez, M., Figueroa, R.G. & Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **122** pp. 28-34, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
6. *Characterization of the VARIAN PaxScan 2020+ flat panel detector for quantitative X-ray imaging* Geser, F.A., Chacón, D., Figueroa, R., Malano F., Santibáñez, M., Valente, M. *X-Ray Spectrometry* **45** (3) pp. 169-175, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
7. *Characterization of hemispherical area X-ray detector based on set of proportional counters with needle anodes* Figueroa, R.G., Santibáñez, M., Valdés, C.N., Valente, M. *Applied Radiation and Isotopes* **107** pp. 191-194, 2016. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
8. *Optimal configuration for detection of gold nanoparticles in tumors using K_{β} X-ray fluorescence line* Figueroa, R.G., Santibáñez, M., Malano, F., Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **117** pp. 198-202, 2015. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
9. *Polymer gel dosimeter based on itaconic acid* Mattea, F., Chacón, D., Vedelago, J., Valente, M., Strumia, M.C. *Applied Radiation and Isotopes* **105** pp. 98-104, 2015. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
10. *Physical characterization of single convergent beam device for teletherapy: Theoretical and Monte Carlo approach* Figueroa, R.G., Valente, M. *Physics in Medicine and Biology* **60** pp. 7191-7206, 2015. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
11. *Molecular structure effects on the post irradiation diffusion in polymer gel dosimeters* Mattea, F., Romero, M.R., Vedelago, J., Chacón D., Valente, M., Strumia, M.C. *Applied Radiation and Isotopes* **100** pp. 101-107, 2015. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
12. *Characterization of ferric ions diffusion in Fricke gel dosimeters by using inverse problem techniques* Vedelago, J., Quiroga, A., Valente, M. *Radiation Effects and Defects in Solids* **169** pp. 845-854, 2014. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
13. *Analytical and numerical methods for anatomical and metabolic medical imaging* BC Malano, F., Valente, M. *Medical Imaging: Procedures, Techniques and Applications* pp. 51-81, 2012. **Get it @** www.scopus.com or Publisher

14. *Calculation of electron and isotopes dose point kernels with fluka Monte Carlo code for dosimetry in nuclear medicine therapy* F. Botta, A. Mairani, G. Battistoni, M. Cremonesi, A. Di Dia, A. Fassó, A. Ferrari, M. Ferrari, G. Paganelli, G. Pedroli, M. Valente *Medical Physics* **38** pp. 3944-3954, 2011. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
15. *Developing and improving a scanning system for dosimetric applications* Pérez, P., Castellano, G., Galván, V., Valente, M. *AIP Conference Proceedings* **1265** pp. 419-422, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
16. *Characterisation of a megavoltage linear accelerator Bremsstrahlung by means of Monte Carlo simulations* Valente, M., Malano, F., Pérez, P., Castro, N., Carrasco, F. *X-Ray Spectrometry* **39** pp. 384-390, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
17. *A computational tool for evaluating the exposure risk in nuclear medicine treatments* Valente, M., Malano, F., Tirao, G. *International Journal of Low Radiation* **7** pp. 333-346, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
18. *3D dose and TCP distribution for radionuclide therapy in nuclear medicine* Valente M., Malano F., Pérez, P. *AIP Conference Proceedings* **1265** pp. 427-430, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
19. *X-ray spectra by means of Monte Carlo simulations for imaging applications* Tirao G., Quintana C., Malano F., Valente, M. *X-Ray Spectrometry* **39** pp. 376-383, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
20. *Mammography image quality optimisation: A Monte Carlo study* Tirao G., Quintana C., Valente, M. *International Journal of Low Radiation* **7** pp. 276-297, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
21. *Fricke gel dosimeter tissue-equivalence: A Monte Carlo study* Valente, M., Bartsaghi, G., Gambarini, G., Brusa D., Castellano, G., Carrara, M. *Astroparticle, Particle and Space Physics, Detectors and Medical Physics Applications - Proceedings of the 10th Conference* pp. 605-609, 2008. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
22. *Study of polymer gel for dose imaging in radiotherapy* Vanossi, E., Carrara, M., Gambarini, G., Mariani, M., Valente, M. *Radiation Measurements* pp. 442-445, 2008. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
23. *Dose distributions in phantoms irradiated in thermal columns of two different nuclear reactors* Gambarini G., Agosteo S., Altieri S., Bortolussi S., Carrara M., Gay S., Nava E., Petrovich C., Rosi G., Valente M. *Radiation Protection Dosimetry* **126** pp. 640-644, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
24. *Optical analysis of gel dosimeters: Comparison of Fricke and normoxic polymer gels* Gambarini, G., Carrara, M., Mariani, M., Pirola L., Tomatis S., Valente, M., Vanossi, E. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **263** pp. 191-195, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
25. *Gel dosimeters as useful dose and thermal-fluence detectors in boron neutron capture therapy* Moss R., Mariani M., Carrara M., Daquino G., Nievaart V., Valente M., Vanossi E. *Radiation Effects and Defects in Solids* pp. 65-70, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
26. *An optimized Monte Carlo (PENELOPE) code for the characterization of gel-layer detectors in radiotherapy* Castellano, G., Brusa, D., Carrara, M., Gambarini, G., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 502-505, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher

27. *Gel dosimetry measurements and Monte Carlo modeling for external radiotherapy photon beams. Comparison with a treatment planning system dose distribution* Valente M., Aon E., Brunetto M., Castellano G., Gallivanone F., Gambarinia, G. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 497-501, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
28. *Gel-layer dosimetry for dose verification in intensity-modulated radiation therapy* Tomatis, S., Carrara, M., Gambarini, G., Marchesini, R., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 506-509, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
29. *Dose distribution measurements by means of gel-layer dosimeters. Evaluation of algorithms for artifacts amendment* Carrara, M., Gambarini, G., Tomatis, S., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **579** pp. 334-338, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
30. *Preliminary results from a polymer gel dosimeter for absorbed dose imaging in radiotherapy* Mariani, M., Vanossi, E., Gambarini, G., Carrara, M., Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **76** pp. 1507-1510, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
31. *PhoNeS: A novel approach to BNCT with conventional radiotherapy accelerators* Bevilacqua R., Giannini G., Calligaris F., Fontanarosa D., Longo F., Scian G., Totaro P., Vittor K., Vallazza E., Severgnini M., Vidimari R., Bartesaghi G., Conti V., Mascagna V., Perboni C., Prest M., Gambarini G., Gay S., Valente M., Mozzanica A., Monti A., Ostinelli A., Azariod L, Fidanzio A., Piermattei A., Borla O., Durisic E., Fasolo F., Nastasi U. Perosino E., Zanini A., Tommasino L. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **572** pp. 231-232, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
32. *3D-reconstruction of absorbed dose obtained from gel-dosimeter-layers* Gambarini, G., Carrara, M., Valente, M. *Astroparticle, Particle and Space Physics, Detectors and Medical Physics Applications - Proceedings of the 9th Conference* pp. 705-709, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
33. *Dose imaging in radiotherapy photon fields with Fricke and normoxic-polymer gels* Gambarini, G., Brusa, D., Carrara, M., Castellano G., Valente, M., Vanossi, E. *Journal of Physics: Conference Series* **41** pp. 466-474, 2006. **Get it @** www.scopus.com or Publisher

Índice

0.1..	Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77	14
0.2..	Ejercicios sencillos de aplicación de programación básica en lenguaje FORTRAN 77	14
1..	Módulo I: Introducción a los Métodos Monte Carlo	17
1.1..	Introducción y aspectos básicos	17
1.1.1..	Historia del método Monte Carlo	17
1.1.2..	Definiciones básicas del proceso de simulación Monte Carlo	17
1.1.3..	Definición básica y preliminar del método Monte Carlo	19
1.2..	Generadores de números aleatorios y concepto de aceptación/rechazo	19
1.3..	Convergencia y precisión del método Monte Carlo	21
1.3.1..	El Teorema del límite central	22
1.3.2..	Precisión del método Monte Carlo	23
1.3.3..	Eficiencia del método Monte Carlo	23
1.3.4..	Ejemplos básicos de integración Monte Carlo	24
1.4..	El método Monte Carlo aplicado a la física atómica y de radiaciones	25
1.4.1..	Transporte y colisión modelados por medio del método Monte Carlo	25
1.4.2..	El método Monte Carlo aplicado a la física de radiaciones y física médica	26
1.5..	Ejercicios sencillos de aplicación integración Monte Carlo	26
2..	Repaso sobre estadística y conteo	29
2.1..	Teoría de distribuciones: Repaso	29
2.2..	Variables aleatorias: Repaso	29
2.2.1..	Distribuciones discretas	30
2.2.2..	Distribuciones continuas	32
2.3..	Números aleatorios y pseudo-aleatorios	33
2.4..	Ejercicios sencillos de aplicación de estadística	34
3..	Repaso sobre Interacción radiación-materia	36
3.1..	Radiaciones ionizantes: Repaso	36
3.2..	Repaso sobre la estructura cuántica de la materia	37
3.3..	Interacción entre radiación incidente y centro dispersor: Repaso	40
3.4..	Repaso sobre la sección eficaz	42
4..	Formalismo del transporte de radiación	45
4.1..	Transporte de radiación e interacciones	45
4.2..	Magnitudes y unidades	48
4.3..	Magnitudes básicas en transporte y dosimetría	49
4.3.1..	Fluencia y tasa de fluencia de fotones, Kerma y exposición	49
5..	Cálculo de integrales definidas	53
5.1..	Introducción al cálculo de integrales definidas por medio del método Monte Carlo	53
5.2..	Propiedades de la integración por el método Monte Carlo	54
5.3..	Ventajas de la integración numérica por el Monte Carlo sobre los métodos determinísticos	55
5.4..	Ejemplos prácticos de aplicación del método Monte Carlo al cálculo de integrales definidas	56
5.4.1..	Estimación del número π con el método de aceptación/rechazo	56
5.4.2..	Cálculo de integral definida de función exponencial	57
5.4.3..	Cálculo de integral definida de función polinomial	58

	11
6.. Módulo VI: Técnicas de reducción de varianzas	61
6.1.. Introducción a la reducción de varianzas	61
6.2.. Metodologías prácticas de reducción de varianzas en el método Monte Carlo	61
6.2.1.. Importancia del método de muestreo	61
6.3.. Ejemplos de aplicación de reducción de varianzas en el método Monte Carlo	62
6.3.1.. Ejercitación sobre reducción de varianzas: función exponencial	64
6.3.2.. Ejercitación sobre reducción de varianzas: función polinomial	64
6.4.. Técnicas de reducción de varianzas implementadas en simulación Monte Carlo de transporte de radiación	64
6.4.1.. Interacción forzada	64
6.4.2.. Splitting y ruleta rusa	65
6.4.3.. Range rejection	66
7.. Módulo VII: Simulación Monte Carlo en física médica	68
7.1.. Generalidades sobre códigos Monte Carlo principales dedicados al transporte de radiación	68
7.2.. Breve reseña práctica sobre los códigos principales PENELOPE y FLUKA	68
7.3.. Ejercicios de aplicación de simulación Monte Carlo en la física médica	68
7.3.1.. Transporte (simplificado) de neutrones en medio material	68
7.3.2.. Dosimetría: Determinación de perfiles on-axis de dosis en profundidad . .	70
7.3.3.. Radiología: Determinación de imágenes radiográficas por rayos X	71
7.3.4.. Medicina nuclear: Determinación de sDPK para emisores γ y β^-	71
7.3.5.. Radioterapia: Modelado de cabezal de acelerador lineal clínico	72
7.3.6.. Protonterapia: Distribución de dosis en fantoma para haces de protones en rango clínico	73
7.4.. Simulación Monte Carlo aplicada a proyectos de investigación y desarrollo en Uni- versidad de La Frontera	74

Tabla de Constantes físicas

Cantidad	Símbolo	Valor
Número de Avogadro	N_A	$6,0221415 \cdot 10^{23} mol^{-1}$
Velocidad luz en vacío	c	$2,99792458 \cdot 10^8 m s^{-1}$
Masa del electrón	m_0, m_e	$9,1093826 \cdot 10^{-31} kg$
Carga del electrón	e, q_e	$1,60217662 \cdot 10^{-19} C$
Constante de Planck reducida	$\hbar \equiv h/2\pi$	$6,58211915 \cdot 10^{-16} eVs$
Energía en reposo de electrón	$m_e c^2$	$510,998918 keV$
Radio clásico del electrón	$r_e \equiv q_e^2 / (m_e c^2)$	$2,817940325 \cdot 10^{-15} m$
Constante de estructura fina	$\alpha \equiv q_e^2 / (\hbar c)$	$1/137,03599911$
Radio de Bohr	$a_0 \equiv \hbar^2 / (m_e q_e^2)$	$0,5291772108 \cdot 10^{-10} m$

Tabla de Conversión de Unidades dosimétricas

Cantidad	Unidad SI	Unidad tradicional
Actividad	1 Bequerel (Bq)	$2,703 \cdot 10^{-11} \text{ Curie (Ci)}$
Energía	1 Joule (J)	$6,242 \cdot 10^{18} \text{ electronVolt (eV)}$
Dosis Absorbida	1 Gray (Gy)	100 rad
Exposición	1 C/kg_{aire}	3876 Roentgen
Dosis Equivalente	1 Sievert (Sv)	100 rems

MÓDULO INICIAL

Rudimentos básicos del lenguaje FORTRAN 77

Módulo INICIAL: Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77

El *Capítulo inicial* está destinado a un adiestramiento básico en el lenguaje de programación FORTRAN 77.

0.1.. Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77

El presente módulo se destina al estudio de los rudimentos básicos del lenguaje FORTRAN 77, los que pueden estudiarse en base a los manuales del lenguaje, como por ejemplo *MANUAL DE FORTRAN 77* [1], versión que está en castellano.

0.2.. Ejercicios sencillos de aplicación de programación básica en lenguaje FORTRAN 77

A continuación, se enuncia las subrutinas que deben ser realizadas y entregadas, de manera individual, por parte de los alumnos:

1. Realizar una subrutina en FORTRAN 77 para sumar dos números, solicitando en terminal la introducción de éstos.
2. Realizar una subrutina en FORTRAN 77 para modelar la suma del lanzamiento de dos dados, reportando gráficamente la distribución de resultados para mil, y para un millón de eventos (lanzamiento de los dados).
3. Realizar una subrutina para sortear posiciones aleatorias en un rectángulo de cuya localización varía entre $[-1, 1]$ en el eje horizontal y entre $[4, 6]$ en el eje vertical, reportando gráficamente las posiciones correspondientes para mil y para un millón de coordenadas.
4. Realizar una subrutina para distribuir uniformemente posiciones en un círculo de 1 cm de radio centrado en $(-1 \text{ cm}, 2 \text{ cm})$, reportando gráficamente las posiciones para mil y para un millón de coordenadas.

La figura 3 muestra resultados típicos, obtenidos por los alumnos de la edición 2021 del curso.

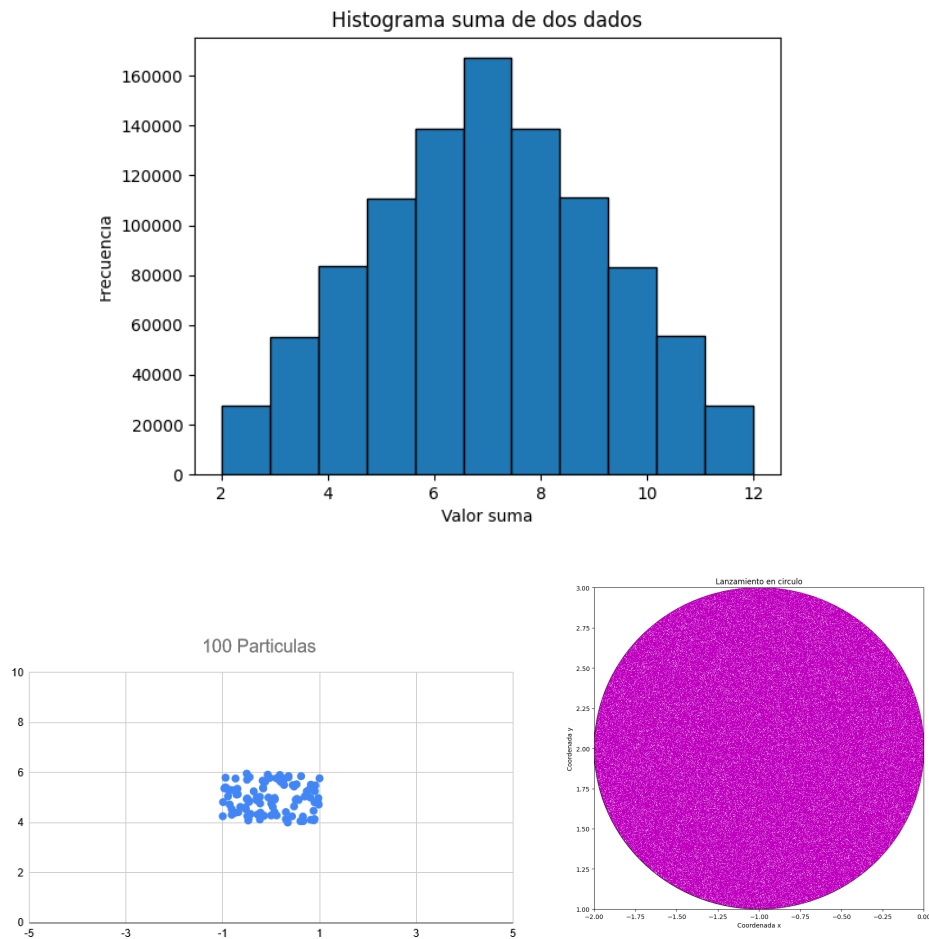


Figura 1. Histograma de la suma del lanzamiento de dos dados (arriba) junto a distribución de posiciones uniformemente distribuidas en un rectángulo (abajo a la izquierda) y en un círculo (abajo a la derecha), obtenidos por los alumnos de la edición 2022 Eduardo Castro, Vicente Cisternas y Tomás Beca.

MÓDULO I

Introducción a los Métodos Monte Carlo

1.. Módulo I: Introducción a los Métodos Monte Carlo

El *Capítulo 1.* está destinado a presentar un breve resumen sobre los aspectos históricos y las ideas fundamentales que subyacen a la técnica de simulación Monte Carlo.

1.1.. Introducción y aspectos básicos

Formamente, el método *Monte Carlo* es una metodología para la resolución numérica de ecuaciones.

1.1.1.. Historia del método Monte Carlo

Desde el punto de vista histórico, los primeros registros de metodologías que utilizaron técnicas que hoy califican dentro del concepto del *método Monte Carlo* se remontan al siglo XVIII, oportunidad en la que el Conde de Buffon en 1773 planteó un peculiar procedimiento para estimar el valor del número π con suficientes cifras significativas.

Posteriormente, durante el siglo XIX, aportes de matemáticos franceses e italianos respecto de la formalización de juegos de azar, significó un nuevo avance en estas técnicas.

A mediados del siglo XX, y dentro del contexto bélico, se acuñó el término "Monte Carlo" a este tipo de metodologías, en referencia a la capital del principado de Mónaco, Monte Carlo, por ser una ciudad mundialmente reconocida como "la capital de los juegos de azar, casinos". Esta denominación en clave se utilizó durante la década de 1940 para el desarrollo de la computadora electrónica durante la generación de herramientas de investigación para apoyar la creación de la bomba atómica, principalmente en lo relativo a la simulación directa de problemas probabilísticos de hidrodinámica de la difusión de neutrones en material de fusión.

Von Neumann y Ulam re-adaptaron esta metodología, asociada a un "ruleta rusa" y los métodos de "particiones" y luego, Harris y Kahn, hacia 1948 dieron lugar a la herramienta en condiciones de ser extendido su uso.

Hacia finales de la década de 1940, Fermi, Metropolis y Ulam obtuvieron los primeros estimadores para los valores característicos de la ecuación de onda de Schrödinger para la captura de neutrones a nivel nuclear.

1.1.2.. Definiciones básicas del proceso de simulación Monte Carlo

- Simulación: es el proceso de diseñar y desarrollar un modelo de cálculo -actualmente se sobre-entiende que es de carácter computacional- para un sistema o proceso, junto a la ejecución de "experimentos" con este modelo, a fin de estudiar/caracterizar el comportamiento del sistema, o bien evaluar estrategias potenciales.
- Modelo de simulación: conjunto de hipótesis respecto del funcionamiento del sistema, caracterizado por expresiones matemáticas y/o lógicas, entre los elementos que componen el sistema.

- Proceso de simulación: es la ejecución en si del modelo a través del tiempo en un sistema de cálculo -actualmente se sobre-entiende que es de carácter computacional- a fin de obtener muestras representativas del comportamiento del sistema de estudio.

Método de simulación

- Simulación estadística o Monte Carlo: Está basada en el muestreo sistemático de variables aleatorias.
- Simulación por autómatas de tipo celular: Se aplica a casos complejos, dividiendo el comportamiento del sistema clases o en subsistemas menores, denominados células. El resultado de la simulación está dado por la interacción de las diversas células.
- Simulación por eventos discretos: Se define el modelo cuyo comportamiento varía en instantes del tiempo dados. Los momentos en los que se producen los cambios son los que se identifican como los eventos del sistema o simulación.
- Simulación continua: Los estados del sistema cambian continuamente su valor. Generalmente, este tipo de simulaciones emplea modelos basados en ecuaciones diferenciales.

Proceso de simulación: etapas

1. Definición, descripción del problema, plan de acción.
2. Formulación del modelo.
3. Programación.
4. Verificación y validación del modelo.
5. Diseño de experimentos y plan de cómputo.
6. Análisis de resultados.

Números aleatorios

- Deben tener igual probabilidad de ser elegidos.
- No debe haber correlación.
- Pueden ser generados a partir de datos tabulados, o bien por dispositivos especiales como la ruleta. Actualmente, se utilizan algoritmos para generar secuencias de números *pseudo-aleatorios*.

Números Pseudo-aleatorios

- Para algunos fines prácticos, reemplazan a los números aleatorios.
- Son generados por medio de algoritmos o fórmulas parametrizadas.

- Su adecuada implementación y uso depende de que se disponga de secuencias suficientemente largas y densas.

Algoritmos para la generación de números Pseudo-aleatorios

- Métodos de Congruencias:

$$r_m = (Ar_{m-1} + B) \text{ mód } N \quad (1)$$

- Método de los centros de cuadrados:

$$44^2 = 1936 \rightarrow 93^2 = 8649... \quad (2)$$

- Método de la transformada inversa:

$$\zeta = F^{-1}(\zeta) ; F(\zeta) = \text{Prob}(X \geq \zeta) \quad (3)$$

1.1.3.. Definición básica y preliminar del método Monte Carlo

Los métodos de Monte Carlo abarcan una variedad de técnicas destinadas a obtener soluciones numéricas a problemas matemáticamente formulados, de aplicación en diferentes campos del conocimiento, por medio de la repetición de pruebas aleatorias. En términos prácticos, las pruebas aleatorias se implementan por medio de cálculos realizados con números aleatorios, o pseudo-aleatorios.

1.2.. Generadores de números aleatorios y concepto de aceptación/rechazo

El método Monte Carlo combina conceptos estadísticos, como el muestreo aleatorio, con la generación de números aleatorios y la sistematización automática de los procesos de cálculo. Matemáticamente, el procedimiento consiste en generar series de números mediante un muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad, resultando de aplicabilidad general a cualquier tipo de problema, ya sea estocástico o, o incluso, determinista.

Por tanto, la generación de una secuencia de números aleatorios es la base probabilística del método Monte Carlo. Debe tenerse presente que dos generadores aleatorios independientes, necesariamente deben proporcionar estadísticamente el mismo valor promedio, y han de ser independientes entre sí, e independientes del resto de números aleatorios de la secuencia o serie.

Desde el punto de vista histórico, se reconoce que el primer intento por conformar una secuencia de números aleatorios, se remonta a 1927, oportunidad en la que en la *Cambridge University Press* se publicó una tabla de números aleatorios para proveer a los investigadores de dicho insumo clave, dicha tabla incluía un poco más de 40 mil números. Luego, en 1947, la *RAND Corporation* generó una secuencia de números a partir de una simulación con métodos electrónicos que emulaban una ruleta, resultados que se publicaron en 1955 como *A Million Random Digits with 100.000 Normal Deviates*.

El pionero en la investigación de algoritmos generadores de números aleatorios fue John von Neumann, quien propuso inicialmente un proceso rudimentario para generar números pseudo-aleatorios por medio del método denominado *middle-square*. Si bien actualmente se sabe que este método no es fiable, y von Neumann lo sabía, en su momento se justificó su uso en base en la rapidez con que podía implementarse en términos comparativos con otros métodos y bajo las capacidades computacionales de la época. Brevemente, el método inicialmente propuesto por von Neumann, consistía en partir de una semilla inicial dada por un número entero (ζ_0) de $2n$ cifras. Se eleva la semilla inicial al cuadrado y se toman los $2n$ dígitos centrales, y éstos se utilizan para formar el siguiente número y reiterar el procedimiento calculando así números pseudoaleatorios, como por ejemplo ($\zeta_0 = 3456$):

1. Semilla inicial $\zeta_0 = 3456$ ($2n$ cifras, $n = 2$).
2. $\zeta_0^2 = 11943936$ (se obtienen $4n$ cifras. Si fuese necesario se agregaría ceros a la izquierda para que el número resultante tenga exactamente $4n$ cifras.)
3. Se toman los $2n$ dígitos centrales, es decir, $\zeta_1 = 9439$.
4. El primer número pseudoaleatorio se obtiene de: $\frac{\zeta_1}{10^{2n}} = 0,9439$.
5. Se repite el procedimiento iniciando con la semilla $\zeta_1 = 9439$.

Este método describe la forma más sencilla de obtener números pseudoaleatorios que corresponden a una distribución uniforme, aunque presenta dos inconvenientes principales: Por un lado, presenta una inherente y fuerte tendencia a degenerar a cero rápidamente, y por otro lado tiene un ciclo de repetición (período) muy corto.

Actualmente, las secuencias aleatorias se obtienen utilizando generadores congruenciales lineales, originalmente propuestos por Derrick Henry Lehmer en 1951. El método congruencial inicia con un valor inicial (semilla) ζ_0 y los sucesivos ζ_n , se obtienen procediendo como sigue (véase 2):

$$\zeta_n = a\zeta_{n-1} + b \text{ mód } m \quad (4)$$

donde a , b y m son enteros positivos denominados: multiplicador, incremento y módulo; respectivamente. En el caso particular de $b = 0$, el generador se denomina multiplicativo; en caso contrario, se denomina mixto.

Y la sucesión de números pseudo-aleatorios x_n , entre 0 y 1, se obtiene como indica la expresión 5:

$$x_n = \zeta_n / m \quad (5)$$

Nótese, sin embargo, que existen algunos inconvenientes con el método de congruencias descrito, a saber: No se trata de una sucesión estrictamente aleatoria en sentido absoluto; aunque una elección *apropiada* de los parámetros iniciales puede generar una sucesión semejante a una sucesión de números aleatorios. Teniendo en cuenta los posibles valores que puede tomar x_n , para que la sucesión se asemeje a una variable continua uniforme en un determinado intervalo, m ha de tomar valores suficientemente grandes ($m \geq 109$) como para que el conjunto de posibles valores sea suficientemente denso en dicho intervalo.

1.3.. Convergencia y precisión del método Monte Carlo

Existe una amplia variedad de problemas asociados al modelado de diferentes campos de aplicación científica. Por ejemplo, al modelar el transporte de radiación, como así también se presenta en la práctica en muy diversos ámbitos, se carece de solución dentro del campo analítico, limitando el uso de *matemática pura/analítica* para la resolución de los mismos.

Éste es el caso, por ejemplo, de la resolución de algunas ecuaciones íntegro-diferenciales. En particular, existen varios teoremas que demuestran la gran limitación de los métodos analíticos para la resolución directa de la ecuación de transporte de Boltzmann, la que rige los procesos de interacción y transporte de radiaciones en medios materiales. De hecho, se conoce como resultado de teoremas que sólo puede resolverse la ecuación de transporte de Boltzmann para una cantidad muy acotada de situaciones, las que involucran condiciones iniciales y de contorno que resultan muy poco realistas en casos de aplicación concreto de problemas físicos.

Por tanto, se propone un método alternativo para encontrar soluciones a la ecuación de transporte de Boltzmann, para lo cual se considerará la reformulación de la misma, a fin de obtener una expresión puramente en términos de integrales definidas [2] para posteriormente aplicar un procedimiento que consiste, básicamente, en el cálculo del valor de una integral definida. De manera tal, que una vez replanteado (re-ordenado) el problema, éste se reducirá a la resolución de una ecuación que contiene integrales definidas, y por tanto podrá salvarse la imposibilidad o inconveniencia de la aplicación de los métodos tradicionales (analíticos) para la solución de diferentes tipos de problemas, en los cuales se ven limitados debido, fundamentalmente, a:

- Desconocimiento de una función primitiva de aquella que se desea integrar.
- Si bien se conoce una función primitiva, resulta excesivamente compleja o extensa su aplicación.

La evaluación de estimadores, como por ejemplo para integrales definidas, por medio el método de Monte Carlo se realiza aplicando el siguiente teorema:

Teorema

Sean x_1, x_2, \dots, x_N N variables aleatorias independientes, idénticamente distribuidas, con función de densidad $f(x)$. Si g_i son funciones de x_i , entonces:

$$G = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i(x) \quad (6)$$

es una variable aleatoria; y se verifica que el valor medio correspondiente ($\langle G \rangle$) cumple con la expresión 7:

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle g_i(x) \rangle \quad (7)$$

Y, la varianza se obtiene de la expresión 8:

$$\sigma^2(G) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sigma^2(g_i(x)) \quad (8)$$

En particular, cuando todas las $g(x_i)$ son idénticas, e iguales a $g(x)$, se obtienen las expresiones 9:

$$\begin{aligned} \langle G \rangle &= \langle g(x) \rangle \\ \sigma^2(G) &= \frac{1}{N} \sigma^2(g(x)) \end{aligned} \quad (9)$$

Por lo tanto, en virtud de la definición de valor medio (o esperanza matemática) de $g(x)$, se obtiene la expresión 10:

$$\langle G \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \right\rangle \approx \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) g(x) dx = \langle g(x) \rangle \quad (10)$$

El resultado obtenido en la expresión 10 justifica la siguiente forma de estimar una integral definida: Muestrear una serie de números aleatorios x_i con función de densidad $f(x)$ y evaluar $g(x)$ para cada x . La media de los valores obtenidos para $g(x)$ es una estimación de la integral. De acuerdo con el teorema de límite central la varianza de esta estimación decrece con el número de términos, según se deduce de la expresión para $\sigma^2(G)$:

$$\sigma(G) = \frac{\sigma(g)}{\sqrt{N}} \quad (11)$$

1.3.1.. El Teorema del límite central

La expresión 12 representa el teorema del límite central:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(S_N) = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi}{N}} \sigma} e^{-\frac{[S_N - \langle G \rangle]^2}{2\sigma^2/N}} \quad (12)$$

donde S_N es el estimador de $\langle G \rangle$, y se verifica que para valores grandes de N ($N \rightarrow \infty$), la suma de N estimaciones aleatorias independientes distribuidas idénticamente aproxima el comportamiento de una distribución normal con media $\langle G \rangle$ y varianza $\frac{\sigma^2}{N}$.

Por tanto, se verifica:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^N g(x_i) f(x_i)}{N} = \langle G \rangle \quad (13)$$

El *Teorema del límite central* puede, de hecho, interpretarse como el núcleo de la formulación matemática del método Monte Carlo, por medio de:

Dado un observable G , que puede expresarse como resultado de un proceso de convolución aleatorio (random), el valor medio de G ($\langle G \rangle$) puede ser obtenido por muestreo de varios valores de G de acuerdo con las funciones de distribución de probabilidades correspondientes al proceso aleatorio involucrado.

El método Monte Carlo es, de hecho, un método de integración numérica capaz de resolver integrales nultidimensionales.

La precisión del método Monte Carlo depende de la cantidad de muestras, es decir del tamaño del espacio muestral (N).

1.3.2.. Precisión del método Monte Carlo

Durante un cálculo por medio del método Monte Carlo, si no se introducen procesos de *bias* destinados acelerar el proceso y/o reducir la cantidad de cómputos necesarios, situación descrita como *simulación honesta*, se verifica no sólo que converge la media del observable x al valor medio de la distribución ($\langle x \rangle$), sino que también convergen la varianza y los momentos de orden superior (orden n) σ_n , dados por la expresión 14:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^n}{N} \right]^{\frac{1}{n}} \equiv \sigma_n \quad (14)$$

destacando que las fluctuaciones y correlaciones son consideradas de manera apropiada y confiable por medio de la expresión 14.

1.3.3.. Eficiencia del método Monte Carlo

Los métodos tradicionales de integración numérica, como por ejemplo, la regla de Simpson, convergen al valor *real* de acuerdo con $N^{-\frac{1}{n}}$, donde N es la cantidad de *puntos* (o intervalos) de muestreo y n es la dimensión del espacio.

Por su parte, el método Monte Carlo converge al valor *real* de acuerdo con $\frac{1}{N}$.

Por lo tanto, el cuadro comparativo 1 resume la *performance* comparativa.

Dimensión del espacio (n)	Métodos Tradicionales	Monte Carlo	Comentario
$n = 1$	$\frac{1}{N}$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$	MC no es conveniente
$n = 2$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$	MC es equivalente
$n > 2$	$\frac{1}{\sqrt[n]{N}}$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$	MC es conveniente

Cuadro 1. Convergencia de integración numérica.

1.3.4.. Ejemplos básicos de integración Monte Carlo

A modo de ejemplo de la aplicación del método Monte Carlo para estimar integrales definidas, se propone a continuación un par de ejemplos sencillos.

Integración Monte Carlo por transformada inversa

Sea la función $f(x) = e^{-\frac{x}{\lambda}}$.

La función de probabilidad acumulativa F se obtiene como indica la expresión 15:

$$F = \int_0^x dx' e^{-\frac{x'}{\lambda}} = \lambda \left[1 - e^{-\frac{x'}{\lambda}} \right] \quad (15)$$

Incorporando la normalización ($||\cdot||$) a la función de probabilidad acumulativa F se obtiene la equivalente, pero normalizada F' a partir de la expresión 16:

$$F' \equiv \frac{F}{||F||} = \int_0^x dx' \frac{e^{-\frac{x'}{\lambda}}}{\lambda} = 1 - e^{-\frac{x}{\lambda}} \quad (16)$$

Para un número (pseudo-) aleatorio $\zeta \in [0, 1]$, se procede como sigue:

$$\zeta = 1 - e^{-\frac{x}{\lambda}} \quad (17)$$

Resolviendo la expresión 17 para la variable x , ésta deba muestrearse (samplearse) según indica la expresión 18:

$$x = -\ln(\zeta - 1) \quad (18)$$

Finamente, repitiendo N veces la operación indicada en la expresión 17, para generar un número (pseudo-) aleatorio $\zeta \in [0, 1]$ uniformemente distribuido, y luego, muestrear x según la expresión 18 para estimar el comportamiento de la función exponencial $f(x) = e^{-\frac{x}{\lambda}}$, para cualquier valor del parámetro λ .

Integración Monte Carlo por aceptación/rechazo

Sea C un valor constante tal que $C > f(x) \forall x \in [a, b]$, entonces se procede como sigue:

1. Generar dos números (pseudo-) aleatorios independientes, ζ_1 y ζ_2 .
2. Si $\zeta_2 \leq \frac{f(\zeta_1)}{C}$ entonces tomar $X = \zeta_1$, es decir *aceptar*. Sino, volver a muestrear ζ_1 y ζ_2 , es decir *rechazar*.

La probabilidad de aceptación de ζ_1 es $f(\zeta_1)/C \forall \zeta_1$, tal como establece la expresión 19:

$$P(x)dx = P(\zeta_1 = x)dx \cdot f(\zeta_1 = x)/C \quad (19)$$

Y, debido a que $P(\zeta_1)dx$ es constante, resulta:

$$P(x)dx = \text{const} \cdot f(x) \quad (20)$$

1.4.. El método Monte Carlo aplicado a la física atómica y de radiaciones

El significativo protagonismo que cobró el método Monte Carlo durante las últimas décadas en áreas de física atómica y nuclear; y consecuentemente en física de radiaciones y en físicamédica, en particular, se debe en gran medida a la capacidad de resolver ecuaciones multidimensionales, como lo es la formulación matemática de modelos de transporte de radiación.

En particular, el transporte de partículas por medio del método Monte Carlo resulta de especial conveniencia, en términos comparativos con otras técnicas de solución numérica.

A lo largo del tiempo, y actualmente, el método Monte Carlo permitió describir una gran variedad de procesos en el ámbito de la física atómica y nuclear, como la emisión de radiación por parte de material inestable y su consecuente interacción con medios materiales.

1.4.1.. Transporte y colisión modelados por medio del método Monte Carlo

En lo referente a la aplicación del método Monte Carlo al transporte y colisión de radiaciones, cabe remarcar:

- Cada partícula (primaria) es modelada/seguida a lo largo de toda la historia de su trayectoria, dando lugar a un *shower* o cascada.
- En cada uno de los pasos del transporte se calcula, a partir de modelos de probabilidades oportunos, las posibles interacciones conjuntamente a las consecuencias asociadas.
- Cada uno de los secundarios que pudiesen ser creados por acción de primarios es modelado en su totalidad previo a continuar con el siguiente primario.
- La precisión y fiabilidad de los resultados obtenidos depende de los modelos y/o bases de datos de las funciones de probabilidad incorporados.
- La *precisión estadística* depende de la cantidad de eventos considerados N , *i.e.* de la cantidad de primarios.
- La convergencia estadística puede acelerarse, incluso sin alterar la representación estadística del proceso, por medio de técnicas de *biasing*¹

¹En Capítulos posteriores se presentará técnicas de reducción de varianzas, por ejemplo.

1.4.2.. El método Monte Carlo aplicado a la física de radiaciones y física médica

La aplicación del método Monte Carlo en ámbito de la física de radiaciones, y médica es una derivación/extensión y/o caso particular de la física de radiaciones en general, con la particularidad de que los materiales de interés son características biológicas o afines.

Los métodos Monte Carlo, a través de diferentes códigos principales como EGS, MCNP, GEANT, FLUKA, PENELOPE; entre otros, han sido introducidos en prácticamente todas las áreas de la física de radiaciones y médica, como dosimetría, aceleradores/generadores de partículas, radioterapia, radiología, sistemas de detección de radiaciones, protección radiológica, radiobiología, radioquímica y técnicas avanzadas como hadronterapia y terapia por captura neutrónica en boro (BNCT). Desde el punto de vista físico, todos los procesos involucrados en estas áreas de física médica están gobernados por la ecuación de transporte de Boltzmann, por lo que disponiendo de funciones de probabilidad (secciones eficaces) confiables y una formulación de la ecuación de Boltzmann en términos puramente de integrales definidas, se garantiza la convergencia del método, incluso de manera eficiente en comparación con métodos alternativos, para resolver problemas en cualquiera de los ámbitos mencionados.

La cantidad de investigaciones y aplicaciones que utilizan al método Monte Carlo en física de radiaciones y médica ha crecido exponencialmente durante las últimas décadas, en gran medida gracias al aumento de capacidades y masividad de los sistemas de cálculo. Por ello, actualmente representa en varios aspectos el procedimiento más preciso, convirtiéndose en el *gold standard* en varios casos.

1.5.. Ejercicios sencillos de aplicación integración Monte Carlo

A continuación, se proponen ejercicios de aplicación para poner en práctica los conceptos del presente módulo, para ser realizados de manera individual, por parte de los alumnos:

1. Obtener una serie de números pseudo-aleatorios implementando el método de congruencias en una rutina de FORTRAN 77, y comparar los resultados para los casos de diez y de mil números con los obtenidos medio de la función/paquete *rand* de MatLab, graficando ambos histogramas de frecuencias.
2. Suponiendo que se dispone de un sistema de cómputo que requiere, en promedio 1 s por operación, estimar el tiempo total de cómputo necesario por parte del método Monte Carlo, para estimar la integral numérica del flujo estacionario de fotones $\Psi(x, y, z, E)$ en un problema específico si se conoce que la regla de Simpson emplea 1 hora para alcanzar la convergencia, y demanda 10 operaciones por cada elemento del espacio muestral, y se presume que Monte Carlo también requiere de 10 operaciones por cada elemento del espacio muestral.
3. Realizar una rutina para estimar la integral numérica $\int_1^2 e^{\frac{z}{2}} dz$, y comparar el valor numérico obtenido para un espacio muestral de $N = 1000$ con la solución analítica exacta.

4. Desarrollar una rutina para estimar, utilizando el método de la aceptación y rechazo, la integral definida $\int_{-1}^1 (1 + x^2) dx$ visualizando gráficamente los resultados para un espacio muestral de mil y de 100 mil; y comparar con el resultado exacto obtenido por método analítico.

MÓDULO II

Repaso sobre estadística y conteo

2.. Repaso sobre estadística y conteo

El Capítulo 2. está dedicado a un repaso breve y superficial de conceptos básicos de estadística y conteo, ya que éstos resultan imprescindibles para la comprensión de la técnica Monte Carlo.

2.1.. Teoría de distribuciones: Repaso

El análisis funcional manifestó un desarrollo significativo entre los siglos XIX y XX, en gran medida motivado por el estudio de los espacios duales.

Uno de los problemas canónicos que impulsaron el desarrollo de las funciones generalizadas es la vibración de cuerdas, planteado por d'Alembert, considerado como el primer ejemplo de utilización de soluciones generalizadas.

A modo de ejemplo, una distribución espacial de masa m puede ser convenientemente caracterizada, dando la densidad de la distribución espacial de la misma. Si $m(\vec{r})$ es la densidad de la distribución de la masa en un intervalo $[\vec{r}_1, \vec{r}_2]$, entonces la masa total del sistema M se obtiene por medio de la expresión 21:

$$M = \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} m(\vec{r}) d\vec{r} \quad (21)$$

Ninguna función ordinaria puede especificar la densidad correspondiente a uno o más puntos con masa positiva. Por ello, se recurre a la *función* δ de Dirac, definida según las propiedades en 22:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= 0 \quad \forall x \in \mathfrak{R} \neq 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx &= 1 \end{aligned} \quad (22)$$

En la teoría de distribuciones resulta de importancia crucial tanto el concepto de *espacio dual*, generalizado por los espacios de Lebesgue, que representa espacios de funciones que admiten medida (medida de Lebesgue), tal como ocurre en la representación de magnitudes mensurables (observables), como también la diferenciación generalizada y las funciones singulares, como la función δ definida por 22 y las integrales impropias.

Uno de los principales objetivos de la teoría estadística es el conocimiento cuantitativo de una determinado subconjunto/subsistema. Para ello, se construye un modelo de la mencionada *realidad* en particular que es objeto de estudio, partiendo de la premisa de que lo real es siempre más complejo y multiforme que cualquier modelo que se pueda construir. Sin embargo, la formulación de *modelos aceptables* permite obviar la existencia del error o diferencia entre la realidad y el modelo.

2.2.. Variables aleatorias: Repaso

Uno de los conceptos más importantes de la teoría de probabilidades es el de *variable aleatoria* que, intuitivamente, puede definirse como cualquier característica medible que

toma diferentes valores con probabilidades determinadas. Toda variable aleatoria posee una distribución de probabilidad que describe su comportamiento. Si la variable es discreta, es decir, si toma valores aislados dentro de un intervalo, su distribución de probabilidad especifica todos los valores posibles de la variable junto con la probabilidad de que cada uno ocurra. En el caso continuo, es decir, cuando la variable puede tomar cualquier valor de un intervalo, la distribución de probabilidad permite determinar las probabilidades correspondientes a sub-intervalos de valores. Una manera usual de describir la distribución de probabilidad de una variable aleatoria es mediante la denominada función de densidad en el caso de variables continuas y función de masa de probabilidad en el caso de variables discretas, en tanto que lo que se conoce como *función de distribución* representa las probabilidades acumuladas.

2.2.1.. Distribuciones discretas

Algunas de las distribuciones discretas más comúnmente encontradas en aplicaciones de diversa índole, son:

- Uniforme discreta
- Binomial
- Hipergeométrica
- Geométrica
- Binomial negativa
- Pascal
- Poisson

La distribución uniforme discreta describe el comportamiento de una variable discreta que puede tomar n valores distintos con la misma probabilidad cada uno de ellos. Un caso particular de esta distribución ocurre cuando los valores son enteros consecutivos. Esta distribución asigna igual probabilidad a todos los valores enteros entre el límite inferior y el límite superior que definen el recorrido de la variable. Si la variable puede tomar valores en $[a, b]$, debe ocurrir que b sea mayor que a , y la variable toma los valores enteros empezando por a , $a + 1$, $a + 2$, etc. hasta el valor máximo b . Por ejemplo, cuando se observa el número obtenido tras el lanzamiento de un dado perfecto, los valores posibles siguen una distribución uniforme discreta en 1, 2, 3, 4, 5, 6, y la probabilidad de cada cara es $1/6$.

La distribución binomial es una distribución discreta muy importante que surge en muchas aplicaciones bioestadísticas. Fue obtenida por Jakob Bernoulli en 1713. Esta distribución aparece de forma natural al realizar repeticiones independientes de un experimento que tenga respuesta binaria, generalmente clasificada como *éxito* o *fracaso*; este experimento recibe el nombre de experimento de Bernoulli. Ejemplos de respuesta binaria pueden ser el hábito de fumar (sí/no), si un paciente hospitalizado desarrolla o no una infección. La variable discreta que cuenta el número de éxitos en n pruebas independientes de ese experimento, cada una de ellas con la misma probabilidad de éxito igual a p , sigue una distribución

binomial de parámetros n y p , que se denota por Este modelo se aplica a poblaciones finitas de las que se toman elementos al azar con reemplazo, y también a poblaciones conceptualmente infinitas, como por ejemplo las piezas que produce una máquina, siempre que el proceso de producción sea estable (la proporción de piezas defectuosas se mantiene constante a largo plazo) y sin memoria (el resultado de cada pieza no depende de las anteriores). Un ejemplo de variable binomial puede ser el número de pacientes con cáncer de pulmón ingresados en una unidad hospitalaria.

La distribución hipergeométrica suele aparecer en procesos muestrales sin reemplazo, en los que se investiga la presencia o ausencia de cierta característica. Considerando, por ejemplo, en un procedimiento de control de calidad en una empresa farmacéutica, durante el cual se extraen muestras de las cápsulas fabricadas y se someten a análisis para determinar su composición. Durante las pruebas, las cápsulas son destruidas y no pueden ser devueltas al lote del que provienen. En esta situación, la variable que cuenta el número de cápsulas que no cumplen los criterios de calidad establecidos sigue una distribución hipergeométrica. Por tanto, esta distribución es la equivalente a la binomial, pero cuando el muestreo se hace sin reemplazo, de forma que la probabilidad de éxito no permanece constante a lo largo de las n pruebas, a diferencia de la distribución binomial. Esta distribución puede ilustrarse del modo siguiente: se tiene una población finita con N elementos, de los cuales R tienen una determinada característica que se llama éxito (diabetes, obesidad, hábito de fumar, etc.). El número de éxitos en una muestra aleatoria de dimensión n , extraída sin reemplazo de la población, es una variable aleatoria con distribución hipergeométrica de parámetros N , R y n .

Suponiendo que se efectúa repetidamente un experimento o prueba, que las repeticiones son independientes y que se está interesado en la ocurrencia o no de un suceso al que se refiere como *éxito*, siendo la probabilidad de este suceso p . La distribución geométrica permite calcular la probabilidad de que tenga que realizarse un número k de repeticiones antes de obtener un éxito por primera vez; esta probabilidad decrece a medida que aumenta k con lo que la función de masa de probabilidad es siempre decreciente. Así pues, se diferencia de la distribución binomial en que el número de repeticiones no está predeterminado, sino que es la variable aleatoria que se mide y, por otra parte, el conjunto de valores posibles de la variable es ilimitado. Para ilustrar el empleo de esta distribución, se supone que cierto medicamento opera exitosamente ante la enfermedad para la cual fue concebido en el 80 % de los casos a los que se aplica; la variable aleatoria *intentos fallidos en la aplicación del medicamento antes del primer éxito* sigue una distribución geométrica de parámetro $p = 0,8$. Otro ejemplo de variable geométrica es el número de hijos hasta el nacimiento de la primera hija. La distribución geométrica se utiliza en la distribución de tiempos de espera, de manera que si los ensayos se realizan a intervalos regulares de tiempo, esta variable aleatoria proporciona el tiempo transcurrido hasta el primer éxito. Esta distribución presenta la propiedad denominada *falta de memoria*, que implica que la probabilidad de tener que esperar un tiempo t no depende del tiempo que ya haya transcurrido.

La distribución de Poisson debe su nombre al matemático Simeón Denis Poisson, aunque ya había sido introducida en 1718 por A. De Moivre como una forma límite de la distribución binomial que surge cuando se observa un evento raro después de un número grande de repeticiones. En general, la distribución de Poisson de parámetro λ se puede utilizar como una aproximación de la binomial, $\text{Bin}(n, p)$, si el número de pruebas n es grande,

pero la probabilidad de éxito p es baja, siendo $\lambda = np$; puede considerarse que la aproximación Poisson-binomial es aceptable, o buena, si $n \geq 20$ y $p \leq 0,05$ y resulta muy buena si $n \geq 100$ y $p \leq 0,01$. La distribución de Poisson también surge cuando un evento o suceso raro ocurre aleatoriamente en el espacio o el tiempo. La variable asociada es el número de ocurrencias del evento en un intervalo o espacio continuo, por tanto, es una variable aleatoria discreta que toma valores enteros de 0 en adelante $(0, 1, 2, \dots)$. Así, el número de pacientes que llegan a un consultorio en un lapso dado, el número de llamadas que recibe un servicio de atención a urgencias durante 1 hora, el número de células anormales en una superficie histológica o el número de glóbulos blancos en un milímetro cúbico de sangre son ejemplos de variables que siguen una distribución de Poisson. En general, es una distribución muy utilizada en diversas áreas de la investigación física, matemática, y médica; entre otras.

2.2.2.. Distribuciones continuas

Algunas de las distribuciones continuas más comúnmente encontradas en aplicaciones de diversa índole, son:

- Uniforme o rectangular
- Normal
- Lognormal
- Logística
- Beta
- Gamma
- Exponencial
- Ji-cuadrado
- t de Student
- F de Snedecor
- Cauchy
- Weibull
- Laplace
- Pareto
- Triangular

A modo de ejemplo, se describe la distribución uniforme, la que es útil para describir una variable aleatoria con probabilidad constante sobre el intervalo (a, b) en el que está definida y se denota por $U(a, b)$. También es conocida con el nombre de distribución rectangular por el aspecto de su función de densidad. Una peculiaridad importante de esta distribución es que la probabilidad de un suceso depende exclusivamente de la amplitud del intervalo considerado y no de su posición en el rango de variación de la variable. Cualquiera que sea la distribución F de cierta variable X , la variable transformada $Y = F(X)$ sigue una distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$. Esta propiedad es fundamental por ser la base para la generación de números aleatorios de cualquier distribución en las técnicas de simulación, y recibe el nombre de método de inversión o de la *transformada inversa*.

La distribución normal es, sin duda, la distribución de probabilidad más importante del cálculo de probabilidades y de la estadística. Fue descubierta, como aproximación de la distribución binomial, por Abraham De Moivre y publicada en 1733; estos resultados fueron ampliados por Pierre-Simon Laplace, quien también realizó aportes importantes. En 1809, Carl Friedrich Gauss publicó un libro sobre el movimiento de los cuerpos celestes donde asumía errores normales, por este motivo esta distribución también es conocida como distribución Gaussiana. La importancia de la distribución normal queda totalmente consolidada por ser la distribución límite de numerosas variables aleatorias, discretas y continuas, como se demuestra a través del teorema del límite central. Las consecuencias de este teorema implica la casi universal presencia de la distribución normal en todos los campos de las ciencias empíricas: biología, medicina, física, economía, etc. En particular, muchas medidas de datos continuos en medicina y en biología (talla, presión arterial, etc.) se aproximan a la distribución normal.

2.3.. Números aleatorios y pseudo-aleatorios

Formalmente, una variable aleatoria es una función que asigna un número real a cada evento en el espacio de probabilidad. La definición de una variable aleatoria en un experimento aleatorio consiste en asociar un valor numérico a cada suceso elemental del experimento. Es de fundamental importancia asignar probabilidades a dichos valores numéricos. Formalmente, dados un experimento aleatorio ε , un espacio muestral Ω , una familia de sucesos en ω con una probabilidad P , se dice que una función X tal que:

$$\begin{aligned} X : \Omega &\rightarrow \mathfrak{R} \\ X^{-1}(-\infty, x] &= \{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\} \end{aligned} \tag{23}$$

la primera línea de la expresión 23 define una *variable aleatoria*, y la segunda línea define un *suceso aleatorio*.

Si bien no se utilizará esta definición en forma explícita, la definición en 23 asegura que sea posible realizar cálculos de probabilidades sobre sucesos definidos en \mathfrak{R} a partir de valores de las variables aleatorias.

Cuando se requiere generar sucesiones u_i de números independientes que se puedan considerar como observaciones de una distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$, existen dos escenarios:

- Números aleatorios verdaderos: Los números completamente aleatorios (no determinísticos) son fáciles de imaginar conceptualmente, por ejemplo podemos imaginar lanzar una moneda, lanzar un dado o una lotería. En general, los números aleatorios se basan en alguna fuente de aleatoriedad física que puede ser teóricamente impredecible (cuántica) o prácticamente impredecible (caótica).
- Números pseudoaleatorios: Los números pseudoaleatorios se generan de manera secuencial con un algoritmo determinístico, formalmente se definen por: i) Función de inicialización: recibe un número (la semilla) y pone al generador en su estado inicial; ii) Función de transición: transforma el estado del generador y iii) Función de salidas: transforma el estado para producir un número fijo de bits (0 ó 1). Una sucesión de bits pseudoaleatorios se obtiene definiendo la semilla y llamando repetidamente la función de transición y la función de salidas.

2.4.. Ejercicios sencillos de aplicación de estadística

A continuación, se proponen ejercicios de aplicación para poner en práctica los conceptos del presente módulo, para ser realizados de manera individual, por parte de los alumnos:

1. Proponer un ejemplo de una situación realista en el que se manifieste la distribución discreta uniforme, generar el conjunto de resultados y obtener la visualización gráfica donde se aprecien las propiedades básicas de la distribución.
2. Estimar la masa total de una distribución bidimensional de densidad uniforme $\rho = 1 \text{ g cm}^{-2}$ de un objeto que se extiende entre $[-2, 2]$ en el eje horizontal y entre $[5, 7]$ en el eje vertical.
3. Utilizar una regla para medir uno de los lados del propio teléfono celular. Repetir la operación 100 veces y analizar la distribución de los resultados obtenidos. Se trata de una variable discreta o continua? Qué tipo de distribución sigue el conjunto de resultados obtenido?
4. Comparar una distribución (continua) normal con una de Poisson. Estimar valores para los parámetros de modo que las distribuciones presenten valor medio similar. Generar la visualización correspondiente y analizar diferencias y similitudes.

MÓDULO III

Repaso sobre interacción radiación-materia

3.. Repaso sobre Interacción radiación-materia

Se presenta un breve repaso de la estructura atómica y del concepto de sección eficaz.

Luego, se estudian los mecanismos de interacción de fotones, partículas cargadas y neutrones con la materia. En el caso de las partículas cargadas, se presentan descripciones microscópica de los procesos de colisión así como teorías de *scattering* (dispersión) múltiple.

Se denominan radiaciones ionizantes aquellas que son capaces de liberar electrones ligados en orbitales atómicos o moleculares, para lo que se requieren energías superiores a unos 10 eV, aproximadamente. En el caso de electrones, positrones y fotones, se restringe el tratamiento a energías entre decenas de eV y centenares de MeV, mientras que para partículas cargadas pesadas se considera el rango energético específico entre decenas de keV/u y centenares de MeV/u. Estos intervalos cubren holgadamente las energías empleadas típicamente en física médica, tanto en diagnóstico como en terapia.

Se estudiará la propagación e interacción de radiación ionizante con medios materiales constituidos por un número de átomos o moléculas por unidad de volumen (N) igual a:

$$N = \frac{N_{Av}\rho}{A_w} \quad (24)$$

donde N_{Av} es el número de Avogadro, ρ la densidad másica y A_w se obtiene de la masa atómica o molar (A): $A_w = A m_u N_{Av}$, para m_u tal que: $m_u N_{Av} \equiv 1 \text{ g mol}^{-1}$. Así, las fórmulas quedan escritas en el sistema CGS, como es habitual en física atómica.

Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas².

3.1.. Radiaciones ionizantes: Repaso

Las radiaciones ionizantes se clasifican atendiendo en primer lugar a la carga eléctrica de las partículas (neutras o cargadas). La segunda característica relevante es la masa de las mismas, de acuerdo con el siguiente cuadro:

$$\begin{array}{l} \text{partículas neutras} \left\{ \begin{array}{l} \text{fotones} \quad x, \gamma \\ \text{neutrones} \end{array} \right. \\ \\ \text{partículas cargadas} \left\{ \begin{array}{l} \text{ligeras } (M = m_e) \quad e^-, e^+ \\ \text{pesadas } (M \gg m_e) \left\{ \begin{array}{l} \text{iones ligeros} \quad \text{H}, \dots, \text{Ne} \\ \text{iones pesados} \quad \text{Na}, \dots, \text{fragmentos de fisión} \\ \text{"exóticas"} \quad \mu^\pm, \pi^\pm, \bar{p}, \dots \end{array} \right. \end{array} \right. \end{array}$$

Figura 2. Cuadro de clasificación de radiaciones ionizantes.

²Las unidades atómicas se definen tomando: $q_e = m_e = \hbar = 1$.

A la radiación constituída por partículas cargadas se la califica como directamente ionizante, mientras que se denomina indirectamente ionizante a radiación de partículas neutras.

La motivación, como se verá, está relacionada con el hecho de que la carga eléctrica determina el modo en que la radiación interacciona con la materia.

3.2.. Repaso sobre la estructura cuántica de la materia

Los procesos a nivel atómico y subatómico se rigen por las leyes de la mecánica cuántica. Considérese una partícula no-relativista de masa M que se mueve en un potencial central $V(r)$.

La ecuación de movimiento (Schrödinger) independiente del tiempo, para valor de energía ϵ es:

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2M} + V(r) \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon \Psi(\vec{r}) \quad (25)$$

Por tanto, se ve que la función de onda de la partícula ($\Psi(\vec{r})$) factoriza como sigue:

$$\Psi_{\epsilon, \ell, m_\ell}(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell, m_\ell}(\vec{r}) \quad (26)$$

donde u son las funciones radiales y Y_{ℓ, m_ℓ} los armónicos esféricos.

Las funciones radiales u pueden determinarse analíticamente en el caso de potencial de Coulomb, pero en general se requiere resolver:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] u(r) = \epsilon u(r) \quad (27)$$

Si el potencial es atractivo, ecuación 27 admite soluciones con autovalores $\epsilon_{n, \ell}$ negativos discretos (n es el número cuántico principal), que representan estados ligados.

Las correspondientes funciones radiales reducidas $u_{n, \ell}(r)$ están normalizadas a la unidad:

$$\int_{\mathbb{R}^+} u_{n, \ell}^2(r) dr = 1 \quad (28)$$

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, que describen partículas libres con energía cinética no-relativista $\epsilon = \frac{1}{2} M v^2$ (espectro continuo). La normalización de las funciones del continuo $u_{\epsilon, \ell}(r)$ es arbitraria. Además, las $u_{\epsilon, \ell}(r)$ presentan un comportamiento asintótico del tipo:

$$u_{\epsilon, \ell} \sim \sin \left(kr - \ell \frac{\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \delta_\ell(k) \right) [r \rightarrow \infty] \quad (29)$$

donde $k \equiv \sqrt{\frac{2M\epsilon}{\hbar^2}}$ es el número de onda y δ_ℓ el defasaje. $\eta \equiv \frac{Z_\infty q_e^2}{\hbar v}$ es el “parámetro de Sommerfeld” para Z_∞ tal que: $V(r) \rightarrow \frac{-Z_\infty q_e^2}{r}$.

Para potenciales de corto alcance se toma $Z_\infty = 0$, mientras que $Z_\infty \neq 0$ para haces en el caso de iones. En el caso particular $V(r) = 0$ se tiene $\eta = 0$ y $\delta_\ell = 0 \forall \ell$, por lo tanto se reduce al caso de ondas planas viajeras:

$$\Psi(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (30)$$

En el tratamiento cuántico-relativista, la ecuación de Schrödinger debe sustituirse por la ecuación de Klein-Gordon si la partícula tiene spin 0 o la ecuación de Dirac si su spin es 1/2.

La ecuación de Dirac independiente del tiempo es:

$$[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + (\beta - 1)Mc^2 + V(r)] \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r}) \quad (31)$$

donde $\vec{\alpha}$ y β son las matrices de Dirac. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se denominan según el número cuántico de momento angular relativista $\kappa \equiv (\ell - j)(2j + 1)$ para $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Las soluciones a esta ecuación pueden encontrarse en literatura especializada³.

Considérese un conjunto de N electrones (masa m_e , carga $-q_e$) de un átomo de número atómico Z . La función de onda atómica $\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ refiere a las “variables de estado” de cada uno de los electrones constituyentes (ζ_j) satisface la ecuación de onda independiente del tiempo:

$$\mathbf{H}_A(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = E \Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) \quad (32)$$

donde \mathbf{H}_A es el Hamiltoniano atómico y contiene, además de las energías cinéticas (no-relativistas) de los electrones constituyentes, las energías potenciales electrostáticas atractivas electrón-núcleo y repulsivas electrón-electrón:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{-Zq_e^2}{r_i} \right) + \sum_{j < i} \frac{q_e^2}{r_{ji}} \quad (33)$$

Es conocido que la ecuación 32 con el Hamiltoniano definido según la expresión 33 no tiene solución exacta, y por tanto es necesario recurrir a aproximaciones para simplificarla.

Por ejemplo, en el modelo de electrones independientes en un campo central se supone que todos los electrones se mueven en un potencial atómico promedio o efectivo $V_{ef}(r)$, elegido de modo que sea una buena aproximación a los potenciales electrostáticos de la ecuación 33.

Luego:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + V_{ef}(r_i) \right] \quad (34)$$

O bien, la formulación correspondiente en el límite relativista:

$$\mathbf{H}_A = \sum_{i=1}^N [c\vec{\alpha}_i \cdot \vec{p}_i + (\beta_i - 1)m_e c^2 + V(r_i)] \quad (35)$$

En este escenario, los potenciales autoconsistentes de tipo Hartree-Fock-Slater o Dirac-Hartree-Fock-Slater constituyen un punto de partida útil para resolver el problema.

Al haber reemplazado el Hamiltoniano original por otro aproximado pero separable, la función de onda atómica se escribirá como un determinante de Slater construido con N orbitales de spin monoparticulares ψ_j , $j = 1, \dots, N$.

$$\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{(N!)}} \begin{vmatrix} \psi_1(\zeta_1) & \cdots & \psi_1(\zeta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\zeta_1) & \cdots & \psi_N(\zeta_N) \end{vmatrix} \quad (36)$$

³No hace al contenido del presente curso.

Por lo tanto, se ve que Ψ es una función de onda antisimétrica, como corresponde a un sistema de fermiones.

El hecho de que las funciones de onda atómicas se expresen como determinantes de Slater simplifica en gran medida la evaluación (analítica o numérica) de elementos de matriz.

Una peculiaridad interesante de los potenciales autoconsistentes tipo Dirac-Hartree-Fock-Slater es que: $|\epsilon_{n,\kappa}| \approx U_{n,\kappa}$. La Figura 3 muestra la energía de ligadura experimental $U_{n\kappa}$ de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros, y las correspondientes predicciones teóricas $|\epsilon_{n,\kappa}|$ de la mecánica cuántica en el tratamiento de sistemas multielec-trónicos.

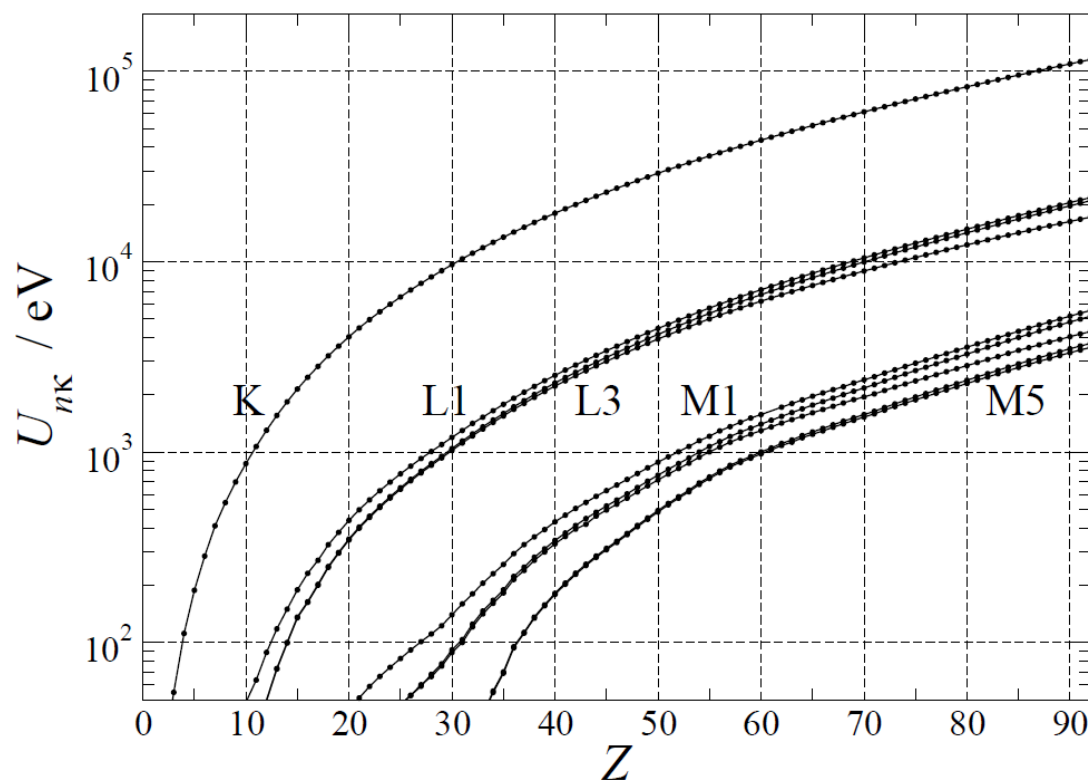


Figura 3. Energías de ionización experimentales (puntos) de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros y predicciones teóricas (líneas continuas) [F. Salvat & J.M. Fernández-Varea].

3.3.. Interacción entre radiación incidente y centro dispersor: Repaso

Cuando un átomo se ve sometido a la influencia de la radiación incidente deben incluirse en el Hamiltoniano \mathbf{H} términos adicionales con las energías de interacción entre el proyectil y los electrones atómicos. La ecuación de Schrödinger (o Dirac) en este caso es difícil o imposible de resolver exactamente, por lo que se recurre a métodos aproximados.

Implementando técnicas de teoría de perturbaciones, se descompone el Hamiltoniano en dos términos: $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'$, siendo la ecuación de Schrödinger con \mathbf{H}_0 resoluble y \mathbf{H}' es considerada como la “perturbación”.

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_A + \mathbf{H}_F \quad (37)$$

donde el hamiltoniano del átomo (\mathbf{H}_A), está dado por las ecuaciones 34 (o 35) y:

$$\mathbf{H}_F \equiv \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} b_{\lambda}^{\dagger} b_{\lambda} \quad (38)$$

es el Hamiltoniano del campo de “fotones libres”.

Cada modo λ corresponde a un vector de onda \vec{k}_{λ} y un vector (unitario) de polarización $\hat{\pi}_{\lambda}$. Los operadores b_{λ}^{\dagger} y b_{λ} actúan sobre los estados $|\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle$ que describen el campo electromagnético libre en la representación de números de ocupación (espacio de Fock); se denominan operadores de creación y aniquilación, respectivamente, debido a que:

$$b_{\lambda}^{\dagger} |\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\lambda} + 1} |\cdots, n_{\lambda} + 1, \cdots\rangle \quad (39)$$

$$b_{\lambda} |\cdots, n_{\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\lambda}} |\cdots, n_{\lambda} - 1, \cdots\rangle \quad (40)$$

El efecto de \mathbf{H}' es inducir transiciones entre estados propios del Hamiltoniano \mathbf{H}_0 .

En el caso de fotones incidentes, el potencial vector asociado es:

$$\vec{A}(\vec{r}) \propto \sum_{\lambda} (\vec{A}_{\lambda} b_{\lambda} + \vec{A}_{\lambda}^* b_{\lambda}^{\dagger}) \quad \vec{A}_{\lambda} \sim \hat{\pi}_{\lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (41)$$

Efectuando el acoplamiento mínimo en la ecuación 34 se obtiene:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N \frac{q_e}{m_e c} \vec{A}(\vec{r}_j) \cdot \vec{p}_j + \sum_{j=1}^N \frac{q_e^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_j) \equiv \mathbf{H}'_{\text{fot1}} + \mathbf{H}'_{\text{fot2}} \quad (42)$$

En el caso relativista, se utiliza el acoplamiento mínimo en la ecuación 35, resultando:

$$\mathbf{H}'_{\text{fot}} = \sum_{j=1}^N q_e \vec{\alpha}_j(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}_j) \quad (43)$$

Por otro lado, cuando la radiación incidente es una partícula cargada (carga $Z^* q_e$, masa M) se tiene que la perturbación es la interacción Coulombiana (instantánea):

$$\mathbf{H}'_{\text{cp}} = \frac{ZZ^* q_e^2}{r_0} + \sum_{j=1}^N \left(\frac{-Z^* q_e^2}{r_{0j}} \right) \equiv \mathbf{H}'_{\text{cp1}} + \mathbf{H}'_{\text{cp2}} \quad (44)$$

aquí se ha utilizado que \vec{r}_0 es la posición de la partícula cargada.

En esta expresión se ha omitido la interacción transversal, un efecto relativista causado por el intercambio de fotones virtuales.

La probabilidad de transición por unidad de tiempo ($W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle}$) de un estado inicial $|i\rangle$ a otro final $|f\rangle$ (ambos propios de \mathbf{H}_0) está dada por la *regla de oro de Fermi*:

$$W_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}|^2 \rho(E_{|f\rangle} = E_{|i\rangle}) \quad (45)$$

donde $\rho(E_{|f\rangle})$ es la densidad de estados finales. Además, se tiene:

$$\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle} = \langle f | \mathbf{H}' | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \mathbf{H}' | n \rangle \langle n | \mathbf{H}' | i \rangle}{E_i - E_n} + \dots \equiv \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(1)} + \mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}^{(2)} + \dots \quad (46)$$

El primer término de la suma de $\mathbf{M}_{|f\rangle, |i\rangle}$ es el término de primer orden, la sumatoria sobre estados intermedios $|n\rangle$ son las contribuciones de segundo orden, etc.

En algunos casos se puede entender cualitativamente -e incluso cuantitativamente- ciertos procesos de interacción de la radiación con la materia por medio de una descripción clásica de los electrones atómicos. El método consiste en considerar que cada átomo (o molécula) neutro posee $N = Z_2$ electrones ligados armónicamente a una posición de equilibrio mediante fuerzas conservativas y lineales.

Se trabaja en el contexto en que f_j de estos electrones tienen frecuencias angulares propias ω_j , verificándose que $\sum_j f_j = Z_2$. En el contexto de la mecánica cuántica esta relación se conoce como regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn, y los f_j se interpretan como intensidades de oscilador.

La dinámica de los electrones con frecuencia angular ω_j está gobernada por la segunda ley de Newton:

$$m_e \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{r} + m_e \Gamma \frac{\partial}{\partial t} \vec{r} + m_e \omega_j^2 \vec{r} = -q_e \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (47)$$

donde Γ un amortiguamiento fenomenológico y $\vec{E}(\vec{r}, t)$ es el campo eléctrico externo debido a la radiación incidente (fotón o partícula cargada).

Si la amplitud de oscilación es lo bastante pequeña, de modo que \vec{E} pueda ser evaluado en la posición de equilibrio del electrón, resulta:

$$\vec{r}(t) = -\frac{q_e}{m_e} \frac{\vec{E}(t)}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \quad (48)$$

En otras situaciones, como por ejemplo en el caso de metales, es útil describir los electrones más débilmente ligados (los de conducción) como si constituyeran un gas de electrones libres y emplear en los cálculos la correspondiente función dieléctrica (compleja)⁴:

$$\epsilon(k, \omega) = \epsilon_{\Re}(k, \omega) + i\epsilon_{\Im}(k, \omega) \quad (49)$$

⁴Véase, por ejemplo, Geser and Valente *A theoretical model for the cross section of the proton-boron fusion nuclear reaction*. RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY, 2020.

La función dieléctrica depende del vector de onda k y la frecuencia angular ω .

La magnitud relevante en este tipo de formalismos es la *función de pérdida de energía* $\Im(1/\epsilon) = \frac{\epsilon_3}{\epsilon_3^2 + \epsilon_3^2}$. Finalmente, cuando la energía de la radiación incidente es muy alta, es posible despreciar las energías de ligadura y las distribuciones de velocidades de todos los electrones del blanco, y describirlos como si estuvieran libres y en reposo.

Las ecuaciones de conservación de la energía y el momentum permiten estimar las energías y direcciones de salida más probables de las partículas luego de interactuar (modalidad colisión binaria).

3.4.. Repaso sobre la sección eficaz

Considérese un experimento de *scattering* (dispersión), en el que se hace incidir sobre un blanco una densidad de flujo (tasa de fluencia) de partículas Φ .

Un detector analiza las \dot{N} partículas que, por unidad de tiempo, han sido desviadas dentro del ángulo sólido $d\Omega$ del detector (determinado por los ángulos polar θ y acimutal ϕ) y llegan con energía entre E' y $E' + dE'$. La *sección eficaz diferencial* de este proceso de colisión ($\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega}$) se define como sigue:

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \equiv \frac{1}{\Phi} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega} \quad (50)$$

En la expresión anterior (50) el último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi (45).

Integrando respecto del ángulo sólido y la energía se obtiene la *sección eficaz total* (σ):

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (51)$$

que tiene dimensiones de superficie.

Es posible interpretar la sección eficaz diferencial como una densidad de probabilidad a partir de la relación:

$$p(E', \theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin(\theta) \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (52)$$

Obsérvese que la sección eficaz diferencial depende del ángulo de dispersión polar θ pero no del ángulo de dispersión acimutal ϕ debido a la simetría cilíndrica del problema.

En un medio condensado (sólido o líquido) la probabilidad de interacción por unidad de longitud se define mediante:

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N} \sigma \quad (53)$$

siendo λ el *camino libre medio* entre colisiones sucesivas. El producto $\mathcal{N} \sigma$ recibe a veces el nombre de *sección eficaz macroscópica* (Σ) o, en el caso de fotones, coeficiente de atenuación lineal (μ).

Las consideraciones anteriores son directamente generalizables si hay diversos mecanismos de interacción (cada uno de tipo i).

Así, se tiene:

$$\sigma_{Total} = \sum_i \sigma_i \quad \wedge \quad \lambda_{Total}^{-1} = \sum_i \lambda_i^{-1} \quad (54)$$

MÓDULO IV

Formalismo del transporte de radiación

4.. Formalismo del transporte de radiación

El *Capítulo 4.* está orientado a exponer un breve repaso sobre los conceptos básicos sobre cantidades involucradas en dosimetría de radiaciones así como consideraciones sobre los principios y teorías de las cuales derivar las cantidades dosimétricas así como las condiciones que deben satisfacerse para la validez de los modelos.

4.1.. Transporte de radiación e interacciones

Para facilitar la exposición, se iniciará el desarrollo en términos de las propiedades de haces de fotones. La generalización a otro tipo de radiación es posible incorporando las particularidades de cada caso, pero conceptualmente el desarrollo es análogo. Sin embargo, cuando corresponda, se hará mención explícita a situaciones específicas que requieran tratamiento particular para otro tipo de radiación.

El principio básico para estudiar los efectos de la interacción de la radiación con la materia, requiere describir el modo en que se transfiere y absorbe energía del haz al medio material. El transporte de partículas en un medio material está descrito por la ecuación de transporte de Boltzmann, que vincula la fluencia de energía emitida por una fuente con las propiedades físicas del medio irradiado de modo que puedan determinarse los mecanismos por los que la energía es impartida y depositada (difundida) en el material.

La ecuación de transporte de radiación de Boltzmann representa, en términos matemáticos, una ecuación integro-diferencial de difusión. A continuación se realiza una breve exposición del formalismo de Boltzmann, con el fin de completitud, pero no se trata de un argumento que requiera especial profundización para los objetivos de este curso.

Existen diferentes maneras en que se produce la interacción entre el haz incidente y el medio irradiado. La probabilidad de que ocurra una interacción de un cierto tipo está físicamente determinada por la sección eficaz σ_j , referida al j -ésimo mecanismo de interacción. Análogamente, la probabilidad total de que se produzca una interacción (de cualquier tipo) está determinada por la sección eficaz total σ .

A nivel macroscópico, la sección eficaz total macroscópica Σ se define mediante:

$$\Sigma \equiv N \sigma \quad (55)$$

donde N es la densidad de centros de dispersión por unidad de volumen, *i.e.* $[N] = \text{cm}^{-3}$.

En vista que los procesos de interacción incluyen absorción y dispersión (*scattering*) de radiación, conviene escribir en modo explícito la dependencia en cada tipo de proceso. Por lo tanto, se tiene:

$$\Sigma = \Sigma_{abs} + \Sigma_{sca} \quad (56)$$

donde Σ_{abs} y Σ_{sca} se refieren a los procesos de absorción y *scattering*, respectivamente.

Así mismo puede determinarse la distribución de colisiones a lo largo del recorrido (*path*) de la partícula:

$$\frac{dn}{ds} = -\Sigma n \quad (57)$$

donde n representa el número de eventos y s es la distancia a lo largo del *path*. De aquí es inmediato verificar:

$$n(s) = n(0) e^{-\Sigma s} \quad (58)$$

Por lo tanto, la distancia promedio entre colisiones sucesivas está dada por:

$$\lambda \equiv \frac{\int_0^\infty s e^{-\Sigma s} ds}{\int_0^\infty e^{-\Sigma s} ds} = \frac{1}{\Sigma} \quad (59)$$

La cantidad λ se denomina camino libre medio (*mean free path*). De aquí se pone de manifiesto la importancia de la sección eficaz y del *mean free path*, que se determinan de acuerdo con el momento de primer orden de la función de distribución.

Una partícula de momento p con longitud de onda $\frac{h}{p}$ transportada en un medio material de espesor x tal que $x \ll \frac{h}{p}$ estará completamente determinada (en su espacio de fase) por la posición \vec{r} , la dirección de movimiento $\vec{\Omega}$, la energía E y el tiempo t .

Sea $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$ la densidad angular de partículas en estados de fase (7D) $[(x, y, z); (\theta, \phi); E; t]$, que representa la densidad de partículas en el volumen $d\vec{r}$ alrededor de \vec{r} , viajando en direcciones $d\vec{\Omega}$ entorno a $\vec{\Omega}$ con energía E a tiempo t .

El flujo vectorial angular de partículas $\vec{\Psi}$ puede obtenerse a partir de la densidad angular y la velocidad \vec{v} de las partículas:

$$\vec{\Psi} \equiv \vec{v} N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (60)$$

El flujo angular escalar (o simplemente flujo angular) Ψ se obtiene a partir de la expresión 60, y sus unidades son $cm^{-2} s^{-1} sr^{-1}$.

Integrando el flujo angular Ψ en todas direcciones para valores dados de E , \vec{r} y t se obtiene una cantidad proporcional a la tasa de población-ocupación del estado (\vec{r}, R, t) , a veces denominado tasa de “reacción” o “creación”. A partir de esto, puede determinarse el flujo escalar (o simplemente flujo) ϕ dado por:

$$\phi \equiv \int_{4\pi} \Psi d\Omega \quad (61)$$

La tasa de ocurrencia de eventos (por unidad de volumen), en términos de la probabilidad de cada j -ésimo tipo de interacción R queda determinada por:

$$R \equiv \Sigma_j \phi \quad (62)$$

La fluencia angular se obtiene a partir de la integral en el tiempo del flujo, y representa el número total de partículas por unidad de área por unidad de energía atravesando el punto \vec{r} con dirección $d\Omega$ entorno a Ω .

Así mismo, puede calcularse la fluencia escalar (o fluencia total) $J(\vec{r}, E, t)$ que resulta de integrar la fluencia angular para todas las direcciones posibles:

$$J = |\vec{J}(\vec{r}, E, t)| = \int_{4\pi} |\vec{v} N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)| d\vec{\Omega} \cdot \hat{n} \quad (63)$$

donde $|\vec{J}|$ es la corriente de partículas y \hat{n} representa un versor en dirección arbitraria para el cálculo de la fluencia escalar J .

A partir de esto, puede plantearse la ecuación de transporte de radiación de Boltzmann, dada por:

$$\frac{1}{|\vec{v}|} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi - S = \iint_{4\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) K(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) dE' d\vec{\Omega}' \quad (64)$$

donde S es la fuente de radiación y $K(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$ es el operador del kernel que cambia el estado de fase de las “coordenadas” primadas $(\vec{\Omega}', E')$ a las sin primar $(\vec{\Omega}, E)$ debido a los procesos de *scattering* en la posición \vec{r} .⁵

Operando y reordenando los términos en la ecuación de Boltzmann 64, resulta:

$$\begin{aligned} t &= t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|} \\ \vec{r} &= \vec{r}_0 + s\vec{\Omega} \end{aligned} \quad (65)$$

Por lo tanto, se obtiene:

$$\frac{d}{ds} \Psi(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|}) + \Sigma \Psi(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|}) = \Gamma(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|}) \quad (66)$$

donde se ha definido $\Gamma(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|})$ como sigue:

$$\Gamma \equiv S + \iint \Sigma_s(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, (\vec{\Omega}', E') \rightarrow (\vec{\Omega}, E)) \Psi(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}', E', t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|}) d\vec{\Omega}' dE' \quad (67)$$

Puede verse⁶

$$\Psi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}, E, t_0) = \int_{-\infty}^0 ds \left[e^{\int_0^s \Sigma(\vec{r}_0 - s'\vec{\Omega}, E) ds'} \Gamma(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t_0 + \frac{s}{|\vec{v}|}) \right] \quad (68)$$

Considerando que las variables \vec{r}_0 y t_0 son arbitrarias, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) &= \int_0^\infty e^{\int_0^s \Sigma(\vec{r}_0 - s'\vec{\Omega}, E) ds'} \cdot \\ &\left[\iint \Sigma_s(\vec{r} - s\vec{\Omega}, (\vec{\Omega}', E') \rightarrow (\vec{\Omega}, E)) \Psi(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}', E', t - \frac{s}{|\vec{v}|}) + S(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E, t) \right] \end{aligned} \quad (69)$$

Es decir, se obtuvo una forma integral para la ecuación de Boltzmann, que puede escribirse en término de operadores⁷:

$$\Psi = \mathbf{K} \Psi + S' \quad (70)$$

⁵ Nótese que el efecto de la interacción es un cambio en la energía y en la dirección de movimiento!

⁶ Hint: Introdúzcase $e^{\int_{-\infty}^s \Sigma(\vec{r}_0 + s'\vec{\Omega}, E) ds'}$ y calcúlese $\frac{d}{ds} \Psi$.

⁷ Resulta conveniente expresar la ecuación de este modo para la resolución numérica de la misma, por ejemplo utilizando métodos estadísticos como Monte Carlo.

Se obtiene la solución para el flujo:

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} \Psi_i \quad (71)$$

Donde los términos son:

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \mathbf{K} \Psi_{i-1} \\ \Psi_0 &= S' \end{aligned} \quad (72)$$

Matemáticamente, la solución obtenida se denomina serie de von Neuman. La interpretación física del formalismo desarrollado es particularmente apropiada en el vínculo entre los términos de la serie y los procesos físicos involucrados. El término de orden 0 se refiere al flujo primario estrictamente proveniente de la fuente de emisión S , mientras que los términos Ψ_i son las contribuciones de *scattering* a orden i obtenidas a partir del operador del *kernel de scattering* \mathbf{K} .

4.2.. Magnitudes y unidades

La dosimetría es una de las áreas más importantes en el campo de la física médica, ya que permite establecer las bases formales para comprender y estudiar cuantitativamente los procesos de interacción de la radiación con la materia, por medio de determinaciones experimentales o cálculos analíticos y/o estocásticos de cantidades relevantes asociadas a los procesos de interacción, como energía transmitida de la fuente de radiación al medio irradiado y dosis absorbida por éste como consecuencia.

En el caso de la dosimetría *convencional*, que se refiere a las metodologías *standard* y canónicas desarrolladas durante décadas y que actualmente cuentan con absoluto consenso sobre su capacidad y fiabilidad, el principal interés se concentra en la radioterapia externa utilizando haces de fotones y electrones de megavoltaje. La dosimetría convencional surgió acompañando las técnicas de irradiación para estimar los efectos en los pacientes irradiados. Es por tanto comprensible que la dosimetría se concentrara en haces externos de fotones y electrones durante sus inicios, ya que los principales generadores de radiación de uso médico proveían este tipo de haces.

Por otro lado, la dosimetría *no convencional* se refiere a las técnicas modernas, muchas de ellas en desarrollo, orientadas a describir los efectos de interacción entre radiación *no convencional*⁸ y el material irradiado.

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

⁸Haces de protones, radiación sincrotron, iones pesados, columnas de neutrones; hadrones en general.

4.3.. Magnitudes básicas en transporte y dosimetría

A continuación se realiza una presentación introductoria para la definición de cantidades dosimétricas. A fin de facilitar la exposición se concentra la discusión inicial sobre haces de fotones, lo cual puede ser posteriormente generalizado, con las particularidades y consideraciones necesarias para los casos de haces de partículas cargadas.

4.3.1.. Fluencia y tasa de fluencia de fotones, Kerma y exposición

La fluencia de fotones (partículas sin carga, desde un punto de vista más general) (j) se define como sigue:

$$j \equiv \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta A} \quad (73)$$

En la expresión 73 se ha introducido el número de fotones ΔN que ingresa a una esfera (imaginaria) de sección transversal ΔA . De aquí que $[j] = cm^{-2}$, típicamente.

Por lo tanto, se tiene que la tasa de fluencia ϕ definida como la fluencia de fotones por unidad de tiempo resulta:

$$\phi \equiv \dot{j} = \frac{dj}{dt} \quad (74)$$

La energía que transporta el haz de partículas es la fluencia de energía (Ψ) dada por:

$$\Psi \equiv \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta A} \quad (75)$$

donde ΔE representa la cantidad de energía que atraviesa el área ΔA . Para propósitos de los rangos de interés en aplicaciones en física médica, típicamente la unidad de fluencia de energía es $[\Psi] = MeV cm^{-2}$.

La fluencia de energía Ψ se obtiene inmediatamente, a partir de la fluencia de partículas, para el caso de haces monoenergéticos⁹:

$$\Psi = jh\nu \quad (76)$$

De donde se obtiene la tasa de fluencia de energía ($\dot{\Psi}$):

$$\dot{\Psi} \equiv \frac{d\Psi}{dt} = \dot{\psi} \quad (77)$$

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

La Kerma¹⁰ está definido, para un dado medio - en particular para el aire, lo que usualmente se denomina Kerma en aire $(K_{air})_{air}$, es¹¹ proporcional a la fluencia de energía Ψ :

$$(K_{air})_{air} \equiv \Psi \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{air} = j h \nu \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{air} \quad (78)$$

⁹Para haces polienergéticos la fluencia de energía se calcula utilizando la fluencia de partículas pesando por la distribución espectral correspondiente.

¹⁰**Kerma**:= **K**inetic **e**nergy **r**eleased in **m**atter

¹¹Aproximación a primer orden, *i.e.* se desprecian las contribuciones de *scattering* de órdenes superiores, y debe ser considerado en puntos "suficientemente alejados" de la fuente de radiación.

donde sea ha introducido $\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_{air}$ que es el coeficiente de transferencia masa-energía para el aire evaluado a la energía del haz de fotones ($h\nu$) en el caso de un haz monocromático.

Puede identificarse a la Kerma total K como formada por dos contribuciones: la componente debida a la transferencia de energía por parte de fluencia de partículas del haz primario que fue transferida en colisiones con el material irradiado, denominada Kerma de colisión K^{col} y la segunda componente de Kerma debida a la transferencia de energía por medio de los procesos radiativos asociados al transporte de partículas cargadas, Kerma radiativa K^{rad} :

$$K = K^{col} + K^{rad} \quad (79)$$

Como ejemplo, en la consideración de un haz de monoenergético en aire, la Kerma por colisión K^{col} resulta entonces proporcional a la fluencia de energía Ψ y, por tanto a la fluencia j :

$$\left(K^{col}\right)_{air} = \Psi \left(\frac{\mu_{ab}}{\rho}\right)_{air} = j h\nu \left(\frac{\mu_{ab}}{\rho}\right)_{air} \quad (80)$$

En la expresión 80 se ha introducido el coeficiente de absorción másico para aire $\left(\frac{\mu_{ab}}{\rho}\right)_{air}$ evaluado a la energía del haz, supuesto monocromético, $h\nu$ ¹².

La relación entre los coeficientes de transferencia masa-energía (en la expresión 78) y de absorción (en la expresión 80) es:

$$\frac{\mu_{ab}}{\rho} = \frac{\mu_{tr}}{\rho} (1 - \bar{f}) \quad (81)$$

La relación se establece a partir de considerar la fracción radiativa, es decir la fracción de energía de las partículas¹³ cargadas que es liberada como radiación de Bremsstrahlung. El parámetro \bar{f} da cuenta precisamente de esta fracción de emisión radiativa. Considerando situaciones típicas en dosimetría de radiaciones de uso médico por medio de técnicas convencionales, puede verse que para materiales de interés biológico, el número atómico Z es bajo, y para energías del haz primario del orden de megavoltaje, la contribución radiativa es una fracción significativamente menor, es decir $\bar{f} \approx 0$, debido a que prácticamente toda la energía transferida por parte del haz primario es absorbida por el material irradiado $\mu_{tr}/\rho \approx \mu_{ab}/\rho$. Entonces $\frac{K^{rad}}{K^{col}} \rightarrow 0$ y $K \approx K^{col}$.

La exposición en aire X está definida a partir de la Kerma en aire de colisión en aire $\left(K^{col}_{air}\right)_{air}$ por medio de:

$$X \equiv \left(K^{col}_{air}\right)_{air} \left[\left(\frac{W_{air}}{q_e} \right) \right]^{-1} \quad (82)$$

donde W_{air}/q_e es la energía media (trabajo) requerida para producir un par iónico en aire seco, cuyo valor es $33,97 eV/par$, aproximadamente.

¹²En bibliografía es posible encontrar denominaciones diferentes, en las que el coeficiente de absorción másico μ_{ab} es llamado μ_{en} .

¹³Secundarias para el caso de un haz primario de partículas no cargadas.

La exposición se mide usualmente, por razones históricas, en unidades $[X] = R$ (Roentgen), lo cual equivale a $2,58 \cdot 10^{-4} \text{ Ckg}^{-1}$, por lo tanto, trabajando en el Sistema **SI** se tiene:

$$\left(K_{air}^{col}\right)_{air} = \left(0,876 \frac{\text{cGy}}{R}\right) X \quad (83)$$

donde se ha introducido la unidad de Gray Gy definida por: $1 \text{ Gy} \equiv \frac{1J}{1kg}$.

MÓDULO V

Cálculo de integrales definidas por Monte Carlo

5.. Cálculo de integrales definidas

El *Capítulo 5.* está dedicado a los procedimientos metodológicos, y ejemplos prácticos de la aplicación del Método Monte Carlo al cálculo de integrales definidas. Se presentan los conceptos y metodologías canónicas, y estos métodos son aplicados en casos prácticos a modo de ejemplo, abordando situaciones sencillas y de dificultad variada.

5.1.. Introducción al cálculo de integrales definidas por medio del método Monte Carlo

La presente sección se basa en algunos conceptos básicos de probabilidad y estadística repasados en Capítulo 1., a partir de los cuales puede verse que la integración numérica por medio del método Monte Carlo es viable y de gran utilidad en un amplio conjunto de situaciones.

Para plantear la viabilidad de aplicar la técnica Monte Carlo al cálculo de integrales definidas, se requiere plantear la regla estadística de la estimación de la media o promedio (momento de primer orden) $E(f(X))$ para cualquier función $f(X)$, cuya distribución de probabilidades sea $P_X(X)$, dada por la expresión 84 a continuación:

$$E(f(X)) = \int f(X) P_X(X) dX \quad (84)$$

donde E representa al estimador, cuya incerteza es σ y está definida a partir de la varianza ($Var(X)$), como sigue:

$$Var(X) \equiv E[(X - E[X])^2] = \sigma[X^2] - (\sigma[X])^2 \quad (85)$$

El principio básico del cálculo de integrales definidas por medio del método Monte Carlo radica en el siguiente procedimiento: Supóngase que requiere integrarse la función (unidimensional) dada por $f(x)$ en el intervalo $x \in (a, b)$, *i.e.*:

$$I \equiv \int_a^b f(x) dx \quad (86)$$

Aplicando el teorema del valor medio, puede verse que la integral I , de la función $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$, la cual es interpretada como el área bajo de la curva $f(x)$, puede calcularse como $I = (b - a) f(\langle x \rangle)$, donde $\langle x \rangle$ representa el valor medio de $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$. La figura 4 ilustra la situación descrita.

En caso de no conocerse el valor medio $\langle x \rangle$, puede estimarse la integral definida I , utilizando un valor aproximado para $\langle x \rangle$, al cual se le asigna genéricamente como x en la figura 4.

En principio, cualquier valor x en el intervalo $[a, b]$ puede considerarse para la estimación de I , por lo tanto el procedimiento resulta siempre aplicable para toda función continua diferenciable $f(x)$. A partir de la figura 4 es inmediato apreciar que según sea la elección

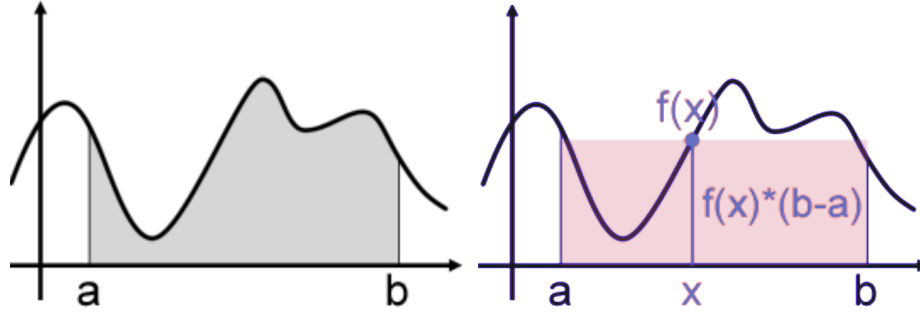


Figura 4. Representación gráfica de la integral definida como área bajo la curva. La figura de la derecha representa la estimación del área sobreada en la figura de la izquierda.

del valor de x , la estimación de I como $I \approx (b - a)f(x)$ resultará mayor o menormente apropiada.

El principio para la aplicación del método Monte Carlo en este contexto, radica en realizar estimaciones aleatorias para el valor de x . Por ello, a medida que se evalúa la función $f(x)$ en diferentes puntos aleatorios, todos en el intervalo $[a, b]$, la estimación numérica de I , por medio de rectángulos, resulta cada vez más cercana al valor real de la integral. Por lo tanto, el procedimiento queda formalizado según la expresión 87:

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{b-a}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i) \quad (87)$$

donde x_i representa los valores aleatorios utilizados para estimar $\langle x \rangle$, i.e. $x_i \in [a, b]$, para los N valores de x_i utilizados (espacio muestral).

Tal como se enunció en el Capítulo 1., cualquier valor aleatorio (distribuido uniformemente) en un intervalo $[x_{min}, x_{max}]$ puede obtenerse a partir de un generador de secuencia (pseudo-)aleatorias, que produzca números distribuidos uniformemente en el intervalo $[0, 1]$, como sigue:

$$x_i = x_{min} + \zeta (x_{max} - x_{min}) \quad (88)$$

donde ζ representa el número (pseudo)aleatorio en $[0, 1]$.

5.2.. Propiedades de la integración por el método Monte Carlo

Como puede verse, realizar una estimación de Monte Carlo no es más que una media muestral. Es decir, se sustituye la población por una función arbitraria de valor real. Por tanto, las estimaciones por medio del Monte Carlo y las medias muestrales comparten las mismas propiedades. A saber:

- Una estimación por medio del método Monte Carlo converge al valor esperado de la función $f(x)$, a medida que el tamaño de la muestra (N) se aproxima al infinito. Es decir, que cuanto mayor sea N , más probabilidad hay de converger al "valor verdadero" (F).

- Un estimador de Monte Carlo es imparcial (objetivo) y consistente. Su tasa de convergencia es proporcional a la varianza de la función ($Var = \sigma^2$). La varianza del estimador es la fórmula: $\frac{\sigma^2}{N}$. En términos prácticos, implica que se necesitan cuatro veces más muestras para reducir la incerteza (error estadístico) de la estimación a la mitad.
- El teorema del límite central precisa la naturaleza de distribución asintótica de la estimación. Es decir: $\langle X \rangle$ sigue una distribución normal.

5.3.. Ventajas de la integración numérica por el Monte Carlo sobre los métodos determinísticos

La idea que subyace en el concepto del estimador de Monte Carlo es ciertamente muy simple, por lo que se presume que es conocida desde hace mucho tiempo, aunque fue concretamente aprovechada a partir de la década de 1940 gracias al desarrollo de metodologías y luego de sistemas informáticos de cálculo, ya que la evaluación de funciones de manera reiterada, *i.e.* una gran cantidad de veces, y promediar los resultados es una tarea que los computadores son capaces de ejecutar de manera mucho más rápida que las personas.

La capacidad de ejecutar estos cálculos de manera eficiente (algo que nunca estuvo disponible antes de la era de los computadores), representó el punto de partida para implementar soluciones a una gran cantidad de problemas importantes y complejos en numerosos campos de la ciencia (matemática, física, biología, etc.). Asimismo, la técnica Monte Carlo puede ser aplicada en otras áreas, como finanzas y tránsito; entre otros.

La razón principal por la que se centra el interés en la técnica Monte Carlo, en lugar de otros métodos numéricos, como por ejemplo la regla de la cuadratura (método de la suma de Riemann) radica principalmente en el hecho de que la técnica Monte Carlo -a diferencia del resto de métodos- mantiene, razonablemente, el nivel de dificultad y la demanda de tiempo de cómputo, cuando se aumenta la dimensión del espacio para calcular la integral definida. Usualmente, los métodos numéricos basados en cuadraturas o abordajes geométricos presentan tasa de convergencia que disminuye (empeora) exponencialmente según la dimensionalidad del problema.

Contrariamente, el principio de la integración numérica de la técnica Monte Carlo puede extenderse fácilmente a una dimensión superior y la tasa de convergencia del método se mantiene independiente de la dimensionalidad. Por ello, y como se estudió en Capítulos previos, las funciones de estado Ψ del sistema pertenecen a espacio, al menos 6D o 7D (según se trate de estado estacionario o no), resaltando la necesidad de contar con un método robusto y eficiente para resolver problemas en varias dimensiones.

Sin embargo, cabe remarcar que para un número dado de muestras, la calidad de la aproximación disminuye al aumentar la dimensión del problema. Pero aún así, se garantiza que obtendrá una solución a un costo fijo (el número de muestras N).

Uno de los elementos clave de una estimación por medio del método Monte Carlo es la capacidad de usar y generar secuencias de números (pseudo-)aleatorios para evaluar la función $f(x)$ para valores "aleatorios" de x dentro del intervalo deseado $[x_{min}, x_{max}]$ (véase figura 4).

5.4.. Ejemplos prácticos de aplicación del método Monte Carlo al cálculo de integrales definidas

La practicidad, e incluso la conveniencia, del método Monte Carlo resulta de carácter especialmente apreciable cuando se pone en práctica la técnica. Por ello, la presente sección se dedica a presentar casos simples -pero representativos- que contribuyan de manera didáctica a la comprensión de la técnica Monte Carlo.

5.4.1.. Estimación del número π con el método de aceptación/rechazo

Uno de los métodos más antiguos utilizados para estimar el valor de π es el método de Buffon, que emplea una serie de líneas paralelas y una vara, cuya longitud guarda correlación con la separación entre líneas, para ser arrojada y determinar el ángulo que forman éstas con las líneas, así como la línea que atraviesa.

El método propuesto a continuación, representa una analogía al método de Buffon. Se considera un círculo de radio unidad centrado en el origen. El área del círculo en el primer cuadrante será $\pi/4$.

Un modo de resolver este problema usando el método Monte Carlo con técnica éxito-fracaso, también denominado método de rechazo, es el siguiente:

1. Generar un par de números aleatorios ζ_1 y ζ_2 uniformemente distribuidos en $[0,1]$.
2. Determinar un punto en el primer cuadrante, de coordenadas (x,y) a partir de ζ_1 y ζ_2 .
3. Determinar la distancia D del punto (x,y) al origen, $D = \sqrt{x^2 + y^2}$.
4. Examinar si la distancia D es mayor o menor al radio R ($R = 1$).
5. Considerar con “éxito” los procesos que den lugar a puntos en el plano dentro de círculo y como “fracaso” los que estén fuera.
6. Calcular las proporciones de éxito y de fracaso.

Las figuras 5 y 6 reportan los resultados obtenidos para la estimación de π por parte de los alumnos de la edición 2020 del curso *El método Monte Carlo en la Física Médica* utilizando el método de aceptación/rechazo.

Se deja a los alumnos realizar una propuesta para un código, de propósitos ilustrativos, para resolver el presente ejemplo.

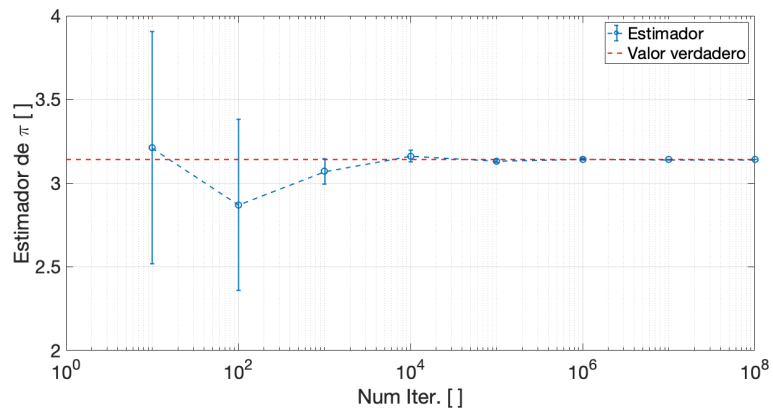


Figura 5. Estimación de π para diferente cantidad de iteraciones.



Figura 6. Comportamiento de la incerteza en la estimación de π en función de la cantidad de iteraciones. **A cargo de alumnos.**

5.4.2.. Cálculo de integral definida de función exponencial

Se propone esta actividad como ejercitación para los alumnos.

El propósito de la actividad se resumen en las siguientes tareas:

1. Repasar los contenidos del Capítulo 1. en relación al método de la transformada y del Capítulo 5. en relación al cálculo de integrales definidas.
2. A modo de ejemplo, considérese la función exponencial $f(z) = 10e^{-2z}$.
3. Realizar un cálculo manual con 5 iteraciones para estimar el valor medio y la incerteza de $I \equiv \int_0^3 10e^{-2z} dz$.

4. Extender el cálculo manual del ítem precedente para 10 iteraciones. Comparar los resultados obtenidos para 5 y para 10 iteraciones.
5. Implementar un cálculo automatizado para realizar 1000 y 100000 iteraciones.
6. Utilícese, a fines cuantitativos, la siguiente información: $I \equiv \int_0^3 10e^{-2z} dz = -5e^{-2z} \Big|_0^3 = [-5e^{-6} - (-5e^0)] = 5(1 - e^{-6}) \approx 5(1 - 0,0025) = 4,9875$.

Las figuras 7 y 8 reportan los resultados obtenidos para la estimación de $I = \int_0^3 10e^{-2z} dz$ por parte de los alumnos de la edición 2020 del curso *El método Monte Carlo en la Física Médica* utilizando el método Monte Carlo.

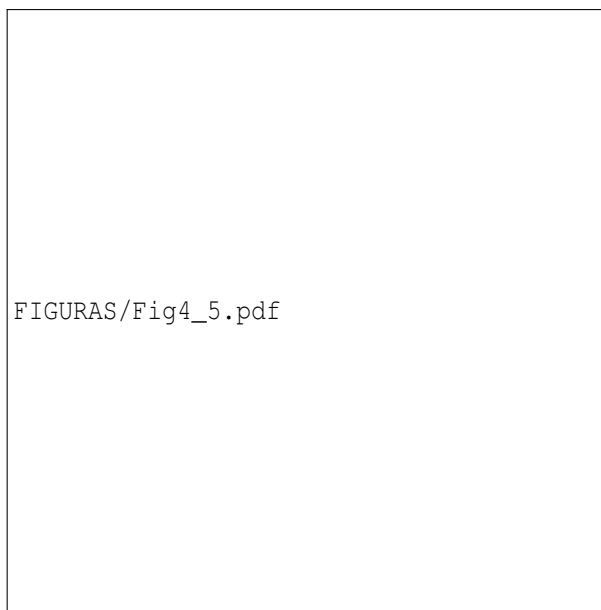
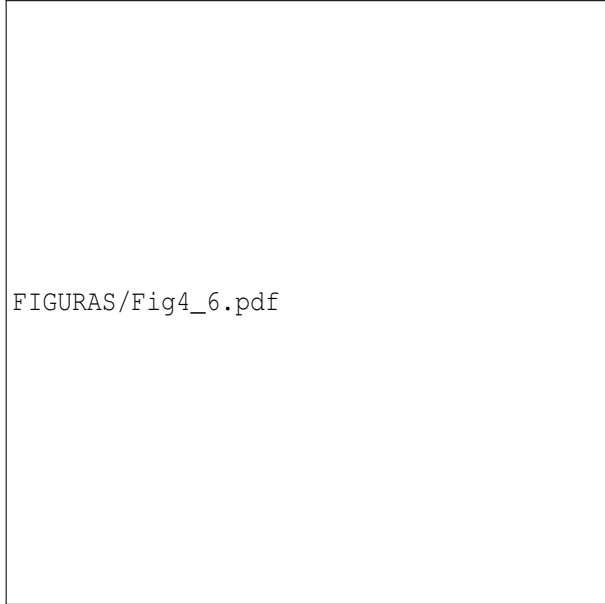


Figura 7. Estimación de $I = \int_0^3 10e^{-2z} dz$ para diferente cantidad de iteraciones. **A cargo de alumnos.**

Los resultados reportados en las figuras 7 y 8 muestran que si bien el método se mantiene robusto y capaz de proveer estimaciones adecuadas, la incerteza asociada resulta más difícil de reducirse en una cantidad de iteraciones "razonable", lo que puede deberse a la alta variabilidad de la función en consideración (exponencial) en el intervalo de interés.

5.4.3.. Cálculo de integral definida de función polinomial

Se propone esta actividad como ejercitación para los alumnos.
El propósito de la actividad se resumen en las siguientes tareas:



FIGURAS/Fig4_6.pdf

Figura 8. Comportamiento de la incerteza en la estimación de $I = \int_0^3 10e^{-2z} dz$ en función de la cantidad de iteraciones. **A cargo de alumnos.**

1. Repasar los contenidos del Capítulo 1. en relación al método de la transformada y del Capítulo 5. en relación al cálculo de integrales definidas.
2. A modo de ejemplo, considérese la función potencial $f(z) = -1 + 2z - 3z^2 + 4z^3$.
3. Realizar un cálculo manual con 5 iteraciones para estimar el valor medio y la incerteza de $I \equiv \int_7^{10} [-1 + 2z - 3z^2 + 4z^3] dz$.
4. Extender el cálculo manual del ítem precedente para 10 iteraciones. Comparar los resultados obtenidos para 5 y para 10 iteraciones.
5. Implementar un cálculo automatizado para realizar 1000000 iteraciones.

6. Utilícese, a fines cuantitativos, la siguiente información:

$$\begin{aligned}
 I &\equiv \int_7^{10} [-1 + 2z - 3z^2 + 4z^3] dz = \int_7^{10} [-1] dz + \int_7^{10} [2z] dz + \int_7^{10} [-3z^2] dz + \\
 &\int_7^{10} [4z^3] dz = -z \Big|_7^{10} + 2 \left(\frac{z^2}{2} \right) \Big|_7^{10} - 3 \left(\frac{z^3}{3} \right) \Big|_7^{10} + 4 \left(\frac{z^4}{4} \right) \Big|_7^{10} = -(10-7) + \\
 &(10^2 - 7^2) - (10^3 - 7^3) + (10^4 - 7^4) = -(10 - 7) + (100 - 49) - (1000 - 343) + (10000 - 2401) = 6990.
 \end{aligned}$$

MÓDULO VI

Técnicas de reducción de varianzas

6.. Módulo VI: Técnicas de reducción de varianzas

El *Capítulo 6.* está dedicado a presentar las técnicas de reducción de varianzas, las que persiguen lograr mejoras en las estimaciones numéricas logradas por la representación estadística del sistema al resolverlo implementando métodos numéricos, como el método Monte Carlo.

6.1.. Introducción a la reducción de varianzas

En los Capítulos precedentes se otorgó mayor protagonismo sólo a uno de los dos estimadores básicos del cálculo numérico, en particular con el método Monte Carlo. Si bien ya se presentaron los procedimientos generales de este método ingenioso aplicándolo a casos simples, es por cierto un hecho que el interés se concentra en utilizar el método para resolver problemas prácticos, que generalmente son más complejos.

Además, tal como se indicó en Capítulos previos, se requiere de dos estimadores, más allá del valor medio está la estimación de la incerteza. En este contexto, la técnica de integración por medio del método Monte Carlo presenta ventajas, aunque también se ve limitada debido a su tasa de convergencia que, a pesar de ser constante, resulta del tipo $O(\sqrt{N})$, es decir que converge con tasa proporcional a la raíz cuadrada del tamaño muestral, dado por N .

En este contexto, se han desarrollado las técnicas conocidas como *reducción de varianzas* destinada a reducir el error durante el procedimiento de solución numérica. Las secciones a continuación están dedicadas a presentar los elementos básicos de las técnicas de reducción de varianzas, especialmente aquellas que resultan más comúnmente aplicadas en la simulación Monte Carlo.

6.2.. Metodologías prácticas de reducción de varianzas en el método Monte Carlo

Tanto las técnicas de reducción de varianza como los métodos de *quasi* Monte Carlo son aspectos de gran utilidad práctica. De hecho, existe mucha y muy variada bibliografía referida a este tipo de metodologías.

Como se vio en la sección de ejercicios prácticos del Capítulo 5., uno de los principales problemas en el método Monte Carlo -como en todo método numérico- es la varianza (en el muestreo, dando lugar a incertezas no despreciables. En principio, y en virtud del teorema del límite central, una estrategia para reducir la incerteza consiste en aumentar el número de muestras N .

En este contexto, existe una gran cantidad de estudios dedicados a investigar maneras de reducir la incerteza por medio de otra vía que no sea sólo el enfoque básico de aumento de N . Esto generó una rama propia dentro de la técnica de Monte Carlo, la cual se denomina *métodos de reducción de varianza*.

6.2.1.. Importancia del método de muestreo

Considérese, a modo de ejemplo, la luminiscencia (o radiancia) en un punto del espacio $P = (x, y, z)$. La radiación que llega a P proviene, en principio, de cualquier dirección del

espacio (ω), lo que puede denotarse matemáticamente como una integral sobre el sector de ángulo sólido, o dominio de la integración, como expresa la fórmula 89:

$$I = \int_{\Omega} I(\omega) d\omega \quad (89)$$

El símbolo Ω representa el ángulo sólido correspondiente al dominio de integración, mientras que $d\omega$ es el diferencial de ángulo sólido entorno a la dirección ω . La función $I(\omega)$ representa, entonces, la radiancia proveniente de la dirección ω .

Desafortunadamente, la integral en la expresión 89 no admite solución genérica (forma cerrada) para cualquier geometría arbitraria. Sin embargo, es posible aproximar el resultado de esta integral por medio del método de integración Monte Carlo.

La estrategia consisten en muestrear el ángulo sólido, o crear un conjunto de N direcciones aleatorias sobre el dominio en el punto P . De este modo, la aproximación a la integral se obtiene como un promedio de la cantidad de luz que proviene de estas N direcciones elegidas aleatoriamente:

$$I \approx \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^{N-1} I_i(\omega_i) \quad (90)$$

donde ω_i representa una dirección aleatoria contenida en Ω , medida en el punto P .

6.3.. Ejemplos de aplicación de reducción de varianzas en el método Monte Carlo

Supóngase que el objetivo es obtener una aproximación para la integral dada por: $I = \int_a^b f(x) dx$. Sea $p(x)$ la función de densidad de probabilidad (pdf) en el intervalo $[a, b]$, y sea ζ una variable (pseudo-)aleatoria definida en el intervalo $[a, b]$, con densidad dada por $p(x)$.

A modo de ejemplo, aplíquese el siguiente procedimiento para estimar la integral:

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) dx \quad (91)$$

Nótese que es posible calcular la función primitiva, y a partir de ésta, "el valor verdadero" de la integral, como indica la expresión 92:

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) dx = -\cos(x) \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 1 \quad (92)$$

Es decir, $I = 1$. La aproximación de I por medio del método Monte Carlo utilizando una pdf dada por: $(p(x) = 2/\pi)$, o bien con una pdf dada por: $p'(x) = 8x/\pi^2$, esta última presentando una dependencia funcional más cercana a la función original, como indica la figura 9.

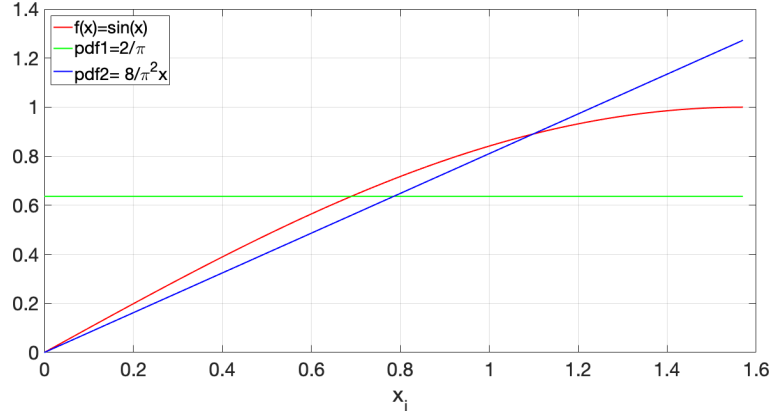


Figura 9. función $f(x) = \sin(x)$, junto a funciones de densidad de probabilidad $pdf1 = 2/\pi$ y $pdf2 = (8/\pi^2)x$.

Por tanto, el principio establece que el muestreo con la $pdf2$ debería generar una reducción de varianza, comparativamente al caso $pdf1$. Para verificarlo, se procede calculando el estimador $\langle I \rangle$ como sigue:

$$\langle I \rangle = \frac{\pi}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \sin(X_i) \quad (93)$$

donde los valores de X_i corresponden a la distribución uniforme ($pdf1$). Mientras, para la $pdf2$ se procede con el muestreo inverso por medio de la expresión 94, recordando que en primera instancia se requiere invertir la función de densidad acumulativa (CDF).

$$CDF(x < \mu) = \int_0^\mu \left[\frac{8x}{\pi^2} \right] dx = \frac{4\mu^2}{\pi^2} \quad (94)$$

Luego, se procede con la inversión de la función:

$$\zeta = \frac{4x^2}{\pi^2} \rightarrow x = \frac{\pi}{2} \sqrt{\zeta} \quad (95)$$

Se deja como ejercicio de aplicación a los alumnos corroborar que, al cabo de 10 iteraciones, la $pdf2$ logra una significativa reducción de varianza, en comparación con el caso del muestreo uniforme de la $pdf1$.

A modo de ejemplo, la Tabla 2 resume los resultados obtenidos para la incerteza aplicando las $pdf1 = p(x) = 2/\pi$ y $pdf2 = (8/\pi^2)x$ en el cálculo de la integral $I = \int_0^{\pi/2} \sin(x) dx$, obtenido por los alumnos de la edición 2020 del curso El Método Monte Carlo en la Física Médica.

Como reporta la tabla 2, la incerteza correspondiente a la $pdf2$ resulta menor a la incerteza correspondiente a la $pdf1$, independientemente de la cantidad de iteraciones. Es decir, se logra efectivamente, a igual cantidad de operaciones (iteraciones) una mejora apreciable (en este ejemplo, entorno al 40 %) en la incerteza caracterizada por la desviación estándar, lo que confirma la capacidad de reducir la varianza.

Iteraciones	σ_{pdf1}	σ_{pdf2}
1E1	0.5718	0.3402
1E2	0.4789	0.3215
1E3	0.4804	0.3276
1E4	0.4827	0.3363
1E5	0.4835	0.3356
1E6	0.4831	0.3352

Cuadro 2. Ejemplo de aplicación práctica de reducción de varianzas por medio del uso de funciones de densidad de probabilidad (*pdf*).

6.3.1.. Ejercitación sobre reducción de varianzas: función exponencial

Repetir la estimación del cálculo de la integral definida de una función exponencial, realizado en la sección 5.3., implementando la técnica de reducción de varianzas por medio de *pdf*.

6.3.2.. Ejercitación sobre reducción de varianzas: función polinomial

Repetir la estimación del cálculo de la integral definida de una función polinomial, realizado en la sección 5.4.3., implementando la técnica de reducción de varianzas por medio de *pdf*.

6.4.. Técnicas de reducción de varianzas implementadas en simulación Monte Carlo de transporte de radiación

La presente sección resume, brevemente, los conceptos más relevantes de las técnicas de reducción de varianzas que se encuentran frecuentemente implementadas en códigos de transporte de radiación por medio del método Monte Carlo.

A modo de ejemplo, se presenta las metodologías implementadas en el código principal PENELOPE.

6.4.1.. Interacción forzada

Existen casos prácticos en los que se presenta una alta variabilidad en la probabilidad del evento de interés, como por ejemplo en el caso del transporte de radiación, la probabilidad de interacción podría ser extremadamente baja. Considérese, por ejemplo, la simulación del espectro de energía de los fotones producidos por efecto Bremsstrahlung de electrones de energía media entorno a 100 keV en una target delgado. Debido a que los eventos radiativos son mucho menos probables que la dispersión elástica e inelástica, la incerteza en el espectro de fotones resultará relativamente grande. Por ello, en situaciones de este tipo -y tal como se describió en secciones previas- se acude a alguno de los métodos eficientes de reducción de varianzas. Entre éstos, se destacan aquellos basados en el aumento artificial de la probabilidad de interacción para el proceso de interés (sea *A* tal proceso=; es decir que se procede a "forzar" que las interacciones de tipo *A* ocurran con más frecuencia de lo que deberían hacerlo en el proceso real.

La puesta en práctica de la interacción forzada en códigos principales de simulación Monte Carlo de transporte de radiación, como el código PENELOPE, por ejemplo consiste en: reemplazar el camino libre medio λ_A del proceso real por uno diferente (más corto) dado por: λ_A^f , que indica la aplicación de la técnica de "forzamiento".

El proceso se completa considerando que las distribuciones de densidad de probabilidad (*pdf*) para la pérdida de energía y las desviaciones angulares; así como las direcciones de las partículas secundarias emitidas (si las hubiere) en las interacciones forzadas son las mismas que para las interacciones reales. Por ejemplo, para el muestreo de la distancia recorrida (camino libre) entre dos colisiones sucesivas, se emplea -como se mencionó en Capítulos previos- una distribución exponencial, cuyo valor medio (momento de primer orden) es justamente el camino libre medio ; en el caso de la aplicación de la interacción forzada, resultará una distribución exponencial cuyo momento de primer orden es: λ_A^f , por lo que resulta equivalente a aumentar la probabilidad de interacción por unidad de camino del proceso A escaleada en un factor $F > 1$ dado por la expresión 96:

$$F = \frac{\lambda_A}{\lambda_A^f} \quad (96)$$

Por último, para evitar distorsiones estadísticas, todas las consecuencias de aplicar la interacción forzada, con factor de forzamiento F se renormalizan a un peso dado por $1/F$.

Como resultado, las cantidades directamente relacionadas con las interacciones forzadas presentarán reducción en el error estadístico, comparando con el caso "estándar". Éste se debe al aumento en el número de ocurrencia del evento forzado (A). Sin embargo, para una dada cantidad de operaciones, o bien para un tiempo de simulación, otras cantidades pueden exhibir desviaciones estándar mayores que las de la simulación sin aplicación de forzamiento, debido a la importancia relativa que se otorga específicamente a simular las interacciones forzadas.

6.4.2.. Splitting y ruleta rusa

Las técnicas de splitting y Ruleta rusa se aplican frecuentemente en conjunto y son efectivas en aquellas situaciones en las que el interés se centra en una dada región espacial bien determinada.

A modo de ejemplo, resulta típico el cálculo de cantidades dosimétricas en regiones profundas de objetos irradiados y, en el caso de haces de radiación colimados, la evaluación de dosis en zonas *off-axis* resulta frecuentemente con incerteza relativa significativa. La idea principal de estos métodos radica en "favorecer" el flujo de radiación hacia la región de interés, inhibiendo la radiación que no alcanza dicha región.

Tal como sucede con la interacción forzada, la reducción de la varianza se logra modificando los pesos (importancia) relativos de las partículas. Las partículas primarias inician su "historia" con un peso unitario, y a cada partícula secundaria producida por una primaria se le asigna un peso inicial igual al de la primaria; en condiciones estándar. El *splitting* consiste en transformar una partícula, con peso ω_0 en cierto estado Ψ_0 , en un número S ($S > 1$) de partículas en idéntico estado Ψ_0 , cada una con peso $\omega = \omega_0/S$. El splitting se aplica cuando la partícula "se acerca", o alcanza, a la región de interés.

La técnica de Ruleta rusa representa, básicamente, el proceso inverso al del *splitting*, ya que cuando una partícula tiende a "alejarse" de la región de interés, ésta es "descartada" según una cierta probabilidad K ($K < 1$); y si subsiste, su peso aumenta en un factor dado por $1/(1 - K)$. En este contexto, "descartar" se entiende como que la historia de la partícula simplemente se finaliza (dehando de contribuir al proceso de simulación). Debido a la renormalización implementada en *splitting* y Ruleta rusa, resulta evidente que no se produce alteración estadística del problema.

6.4.3.. Range rejection

El método de Método de *range rejection* o "rechazo por rango", consiste, básicamente, en absorber una partícula (y sus posibles secundarios) en situaciones en que se especula que ésta (o sus secundarios) no podría salir (o ingresar) regiones de interés. Este método de rechazo por rango es particularmente útil, por ejemplo, cuando se calcula la deposición de energía total de partículas cargadas (en el caso de PENELOPE: electrones o positrones) en una región que se especula espacial dada. Cuando el rango residual de una partícula cargada (y, por ende como cota para sus posibles secundarios) es menor que la distancia a la superficie límite más cercana de la región de interés, la partícula depositará toda su energía dentro o fuera de la región considerada (dependiendo de su posición actual) y la simulación del recorrido puede obviarse. Contrariamente, la técnica de rechazo por rango no es adecuada para la simulación de transporte de partículas no cargadas (fotones en el caso de PENELOPE), ya que el concepto de rango de fotones no está bien definido; o siendo estrictos las fluctuaciones en la distancia recorrida entre dos colisiones sucesivas es significativa.

MÓDULO VII

Simulación Monte Carlo en física médica

7.. Módulo VII: Simulación Monte Carlo en física médica

El *Capítulo 7.* está dedicado a tareas puramente de aplicación práctica, implementando códigos de simulación Monte Carlo en problemas de diferentes áreas de interés en la física médica. A diferencia de los Capítulos previos, el presente Capítulo se enfoca en actividades prácticas, para las cuales se proveerá consignas, y el conjunto de herramientas informáticas necesarias para su cumplimiento.

7.1.. Generalidades sobre códigos Monte Carlo principales dedicados al transporte de radiación

Toda la información y los detalles sobre los códigos de simulación PENELOPE y FLUKA están disponibles en la bibliografía, los respectivos manuales, [12] y [23].

7.2.. Breve reseña práctica sobre los códigos principales PENELOPE y FLUKA

7.3.. Ejercicios de aplicación de simulación Monte Carlo en la física médica

Las técnicas desimulación Monte Carlo han sido aplicadas en áreas y problemas de interés de la física médica desde hace varias décadas. El desarrollo de entornos para simulación Monte Carlo del transporte de radiación, inicialmente orientado a física atómica y/o física de partículas, pudo ser rápida y fácilmente aprovechado en aplicaciones de física médica.

La simulación Monte Carlo del transporte de radiación consiste, básicamente, de resolver la ecuación principal de transporte de Boltzmann (64) para el caso puntual de interés. Como ya se describió en Capítulos previos (véase, por ejemplo, Capítulo 4.) el formalismo del transporte de radiación puede describirse por medio de ecuaciones de integrales definidas, por lo tanto el método de solución numérica de Monte Carlo junto al conocimiento de las propiedades de interacción radiación-materia, básicamente las secciones eficaces (que representan las funciones de densidad de probabilidad), es toda la información necesaria para lograr resolver el problema.

En las secciones siguientes se presenta, superficialmente, la aplicación del método de simulación Monte Carlo en diferentes áreas de la física de radiaciones y física médica; iniciando con un ejemplo práctico sobre-simplificado con fines didácticos y continuando con el uso de códigos validados de simulación Monte Carlo, PENELOPE y FLUKA.

7.3.1.. Transporte (simplificado) de neutrones en medio material

Se propone, a modo de ejemplo, preparar un modelo de sencillo de simulación Monte Carlo de transporte de partículas considerando las siguientes características:

- Partículas indistinguibles (equivalentes) transportándose en un medio material uniforme y homogéneo.
- Sólo 2 tipos de mecanismos de interacción: absorción o scattering, caracterizados por σ_{abs} y σ_{sca} , respectivamente.

- Emisión puntual isotrópica.

Utilizando valores numéricos $\lambda_{abs} \sim 40\text{cm}$ y $\lambda_{sca} \sim 0,2\text{cm}$:

1. Estimar la distribución espacial de las posiciones de absorción de 50000 partículas, como indica la figura 10.

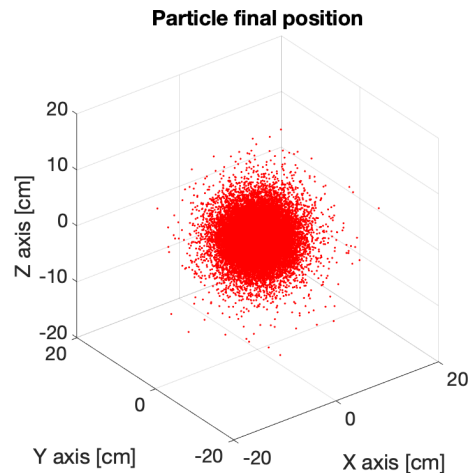


Figura 10. Posiciones de absorción.

2. Estimar la distribución de distancia total recorrida, como indica la figura 11.

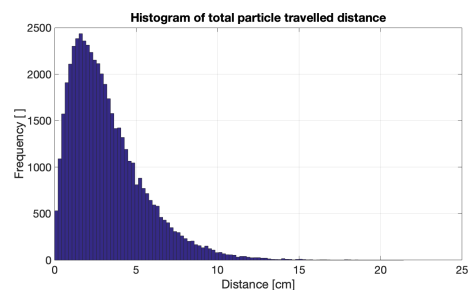


Figura 11. Distribución de distancia recorrida.

3. Estimar la distribución de la cantidad de colisiones (eventos), como indica la figura 12.

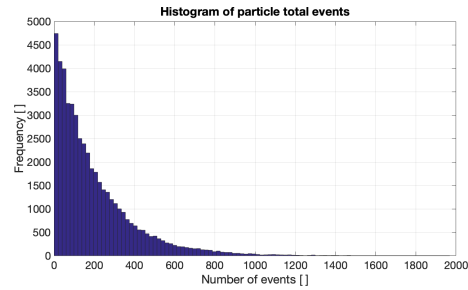


Figura 12. Distribución de número de eventos.

7.3.2.. Dosimetría: Determinación de perfiles on-axis de dosis en profundidad

El perfil porcentual de dosis en profundidad *PDD* (*Percentage Depth Dose*) representa la dosis, normalizada su máximo a 100 %, sobre el eje central de un campo de radiación que incide en un *fantoma* (objeto inanimado/inerte) utilizado para emular las propiedades de absorción y dispersión de radioación ionizante por parte de pacientes, bajo condiciones de irradiación de referencia (distancia de la fuente de radiación a la superficie de impacto de 100 cm, tamaño de campo en superficie de impacto de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, etc.)

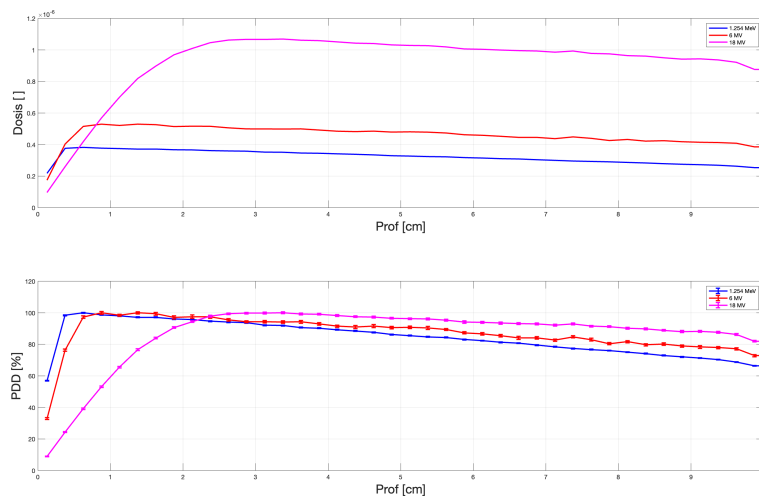


Figura 13. PDD de fotones obtenida por alumnos MFM edición 2022.

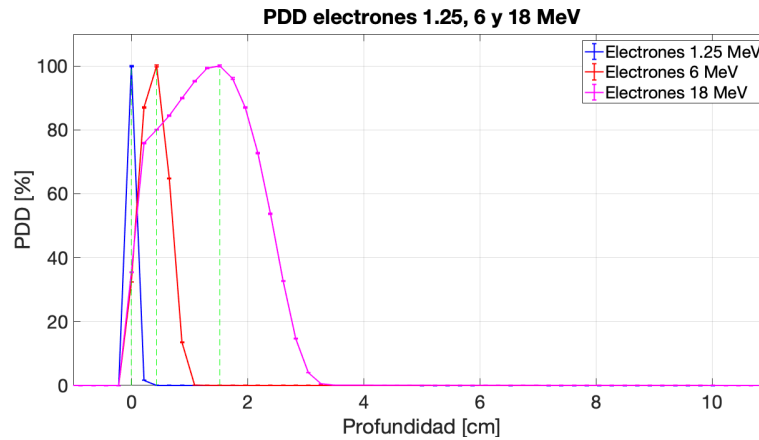


Figura 14. PDD de electrones obtenida por alumnos MFM edición 2020.

7.3.3.. Radiología: Determinación de imágenes radiográficas por rayos X

La figura 15 reporta los resultados obtenidos por los alumnos de la edición 2020 del curso.

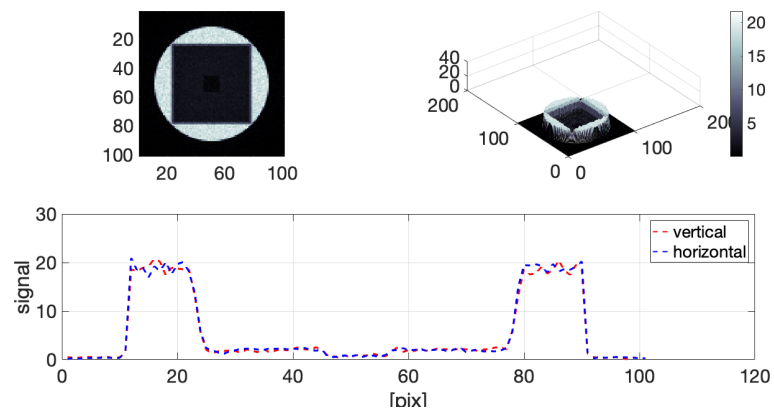


Figura 15. Radiografía por contraste de absorción de rayos X de muestra de agua conteniendo región de plomo en su interior.

7.3.4.. Medicina nuclear: Determinación de sDPK para emisores γ y β^-

La figura 16 reporta los resultados obtenidos por los alumnos de la edición 2020 del curso.

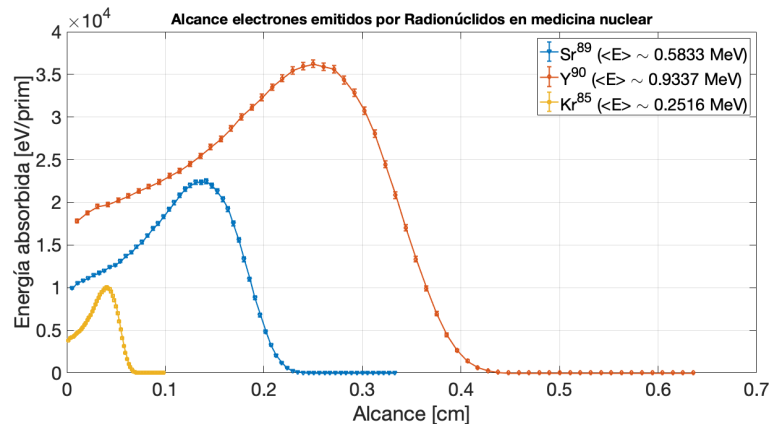


Figura 16. Núcleos de energía absorbida en *shells* para diferentes isótopos emisores β^- como parte principal de sDPK.

7.3.5.. Radioterapia: Modelado de cabezal de acelerador lineal clínico

Las figuras 17, 18 y 19 reportan los resultados obtenidos por los alumnos de la edición 2020 del curso.

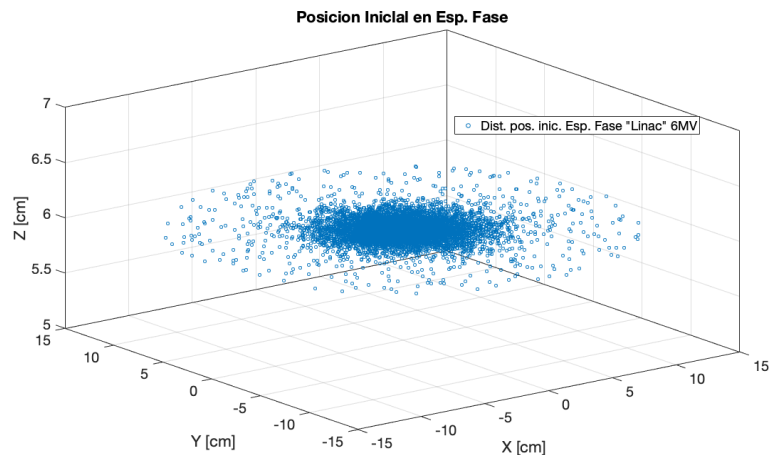


Figura 17. Posición inicial e partículas producidas por cabezal de LINAC (tomado de espacio de fase generado).

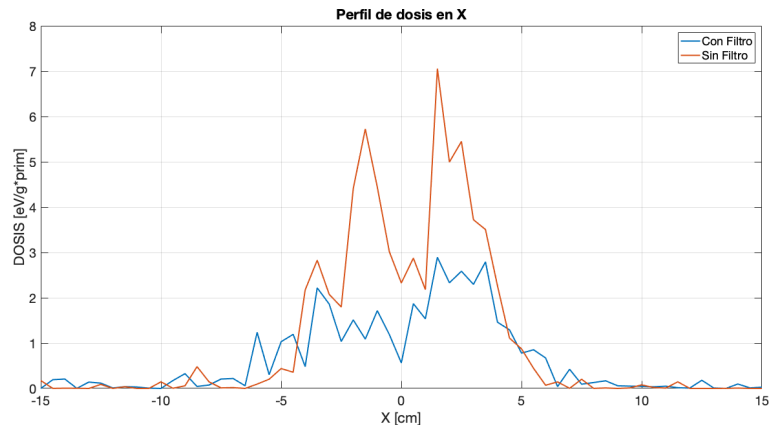


Figura 18. Perfil de dosis (transversal) en fantoma con y sin filtro aplanador incorporado al esquema del cabezal del LINAC.

7.3.6.. Protonterapia: Distribución de dosis en fantoma para haces de protones en rango clínico

La figura 20 reporta los resultados obtenidos por los alumnos de la edición 2020 del curso.

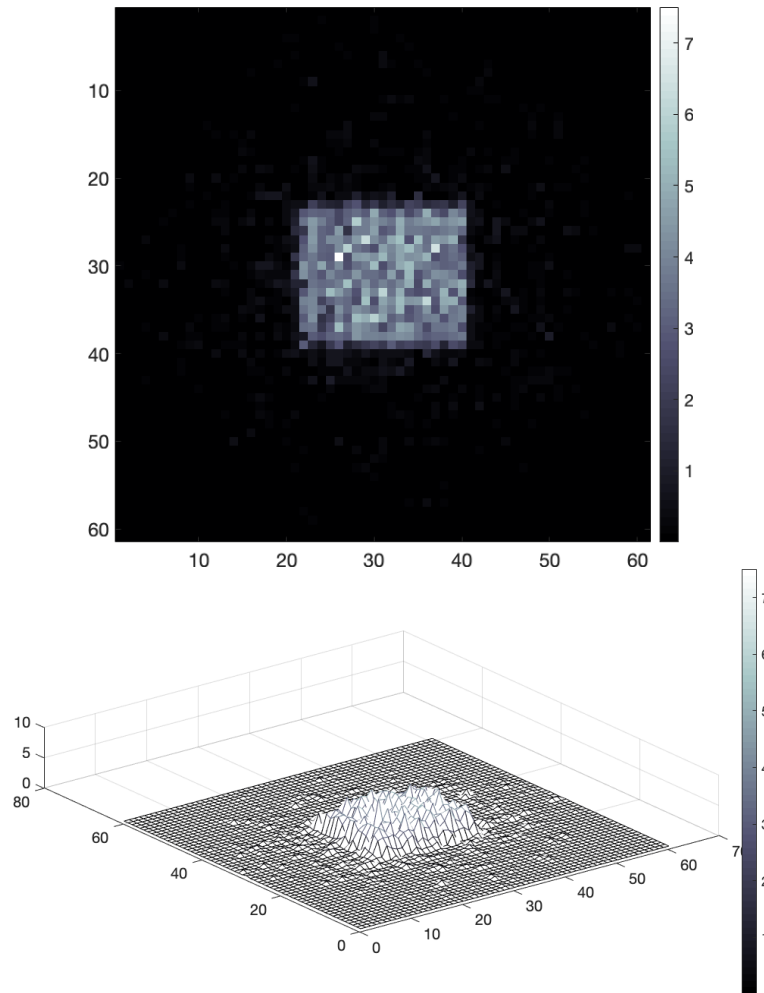


Figura 19. Dosis en superficie de fantoma indicando colimación cuadrada lograda por sistema de mordazas, tipo *jaws* incorporado al cabezal del INAC: mapa 2D (arriba) y gráfico de superficie (abajo).

7.4.. Simulación Monte Carlo aplicada a proyectos de investigación y desarrollo en Universidad de La Frontera

La figura 21 reporta uno de los tantos ejemplos de proyectos e investigaciones en UFRO en los que se utiliza técnicas de simulación Monte Carlo.

FIGURAS/FigYY.pdf

Figura 20. Perfil dosimétrico de un haz de protones de 150 MeV/u.

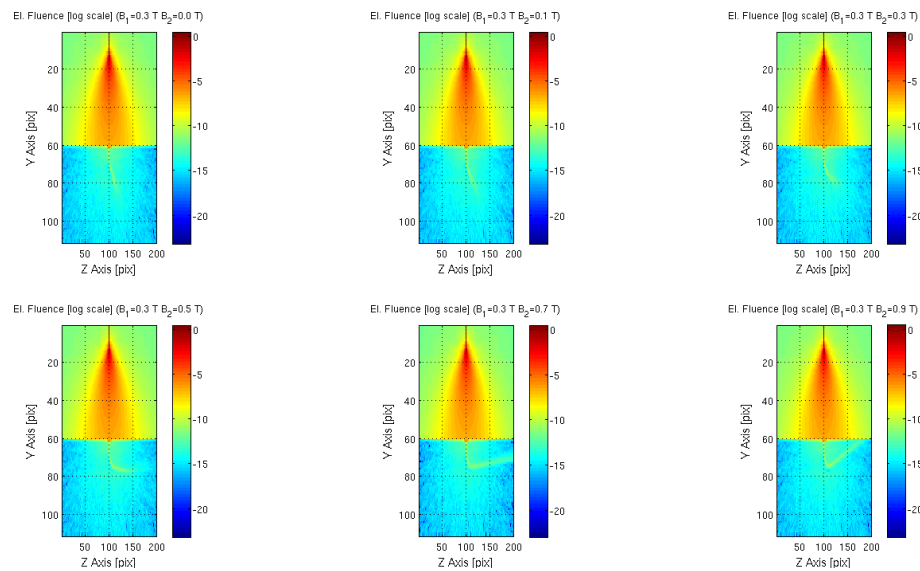


Figura 21. Ejemplo del uso de técnicas de simulación Monte Carlo en i+d en UFRO: transporte y colisión de partículas acoplado a intensos campos electromagnéticos externos para diseño de dispositivo CONVERAY.

Referencias

- [1] J. García Quesada. *Manual de FORTRAN 77*, 2000.
- [2] M. Valente. *Fundamentos de física médica* Ed. 2020, LIIFAMIR^X - FAMAF, Universidad Nacional de Córdoba; Argentina, 2020.
- [3] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. Elsevier Academic Press, California, 2009.
- [4] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincot Williams and Wilkins, 2001.
- [5] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [6] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, second edition, 2009.
- [7] P. Duvauchelle, N. Freud, V. Kaftandjian, and D. Babot. A computer code to simulate x-ray imaging techniques. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, (170):245–258, 2000.
- [8] S. España, J. L. Herraiz, E. Vicente, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. M. Udias. Penelope, a monte carlo pet simulation tool based on penelope: features and validation. *Phys. Med. Biol.*, (54):1723–1742, 2009.
- [9] G. Tirao, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [10] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [11] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [12] J.M. Fernández-Varea, J. empau and F. Salvat, S.; Fernández-Varea. *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. Nuclear Energy Agency, Barcelona, Spain, 2009.
- [13] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [14] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluver-Plenum, New York., 2002.
- [15] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [16] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [17] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.

- [18] J. Ducote and S. Molloy. Scatter correction in digital mammography based on image deconvolution. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 55(No. 5):1295–1309, March 2010.
- [19] C. Arvanitis and R. Speller. Quantitative contrast-enhanced mammography for contrast medium kinetics studies. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 54(No. 5):6041–6064, September 2009.
- [20] A. Kak and M. Slaney. *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. IEEE Press, New York, 2001.
- [21] S. Bushong. *Computed Tomography*. McGraw-Hill, 2000.
- [22] M. Stabin. *Fundamentals of nuclear medicine dosimetry*. Springer Science+Business Media, Spring Street, New York, NY 10013, USA, 2008.
- [23] A. Ferrari et al. *Fluka: a multi-particle transport code* v. 2011.1.2 ORGANISATION EUROPÉENNE POUR LA RECHERCHE NUCLÉAIRE CERN, 2012.