



“Análisis de diferentes formas de cálculo de dosis en terapias por captura neutrónica utilizando MCNP”

**ESPECIALIZACIÓN EN REACTORES NUCLEARES
Y SU CICLO DE COMBUSTIBLE**

Alumno: Beceyro Ferrán, Agustín

Director: Ramos, Ricardo Luis

Co-director: Sztejnberg, Manuel



UNSAM
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE
SAN MARTÍN

Índice

1. Resumen	1
2. Introducción	2
2.1. Terapia por Captura Neutrónica en Boro	2
2.2. Transporte de Partículas y Métodos Monte Carlo	6
2.2.1. Unidades y Medidas	6
2.2.2. Ecuación de Boltzmann	7
2.2.3. Métodos Monte Carlo	9
2.2.3.1. Reseña Histórica	9
2.2.3.2. Resolución por Monte Carlo	10
2.2.3.3. Transporte de partículas en Monte Carlo	12
2.2.3.4. MCNP	14
2.4. Dosimetría	14
2.4.1. Unidades y Medidas	15
2.4.2. Dosis por Fotones	17
2.4.3. Dosis por Neutrones	17
2.4.4. Análisis Dosimétrico	18
3. Métodos y materiales	19
3.1. Comparación MCNP X, 5, 6 y 6 beta	20
3.2. Comparación de semillas	20
3.3. Comparación de tallies	20
3.4. Comparación de composición del fantoma	23
4. Resultados y discusiones	25
4.1. Comparación MCNP X, 5, 6 y 6 beta	25
4.2. Comparación de semillas	27
4.3. Comparación de tallies	28
4.4. Comparación de composición del fantoma	30
5. Conclusiones	33
6. Referencias bibliográficas	34
Anexo – Archivo input MCNP	36

1. Resumen

La Terapia por Captura Neutrónica en Boro (BNCT) es un tratamiento para tumores malignos. Durante las tareas de investigación y de planificación de este tratamiento es necesario realizar un estudio dosimétrico consistente. Uno de los programas más utilizados en dicho cálculo es MCNP (Monte Carlo N-Particle), basado en los métodos numéricos Monte Carlo para simular el transporte de partículas en geometrías complejas. Con el modelado del tejido y de la fuente, esta herramienta permite el cálculo de distribuciones de dosis mediante diferentes rutinas. Existen en la actualidad, distintas versiones de MCNP y diferentes herramientas para el cálculo de dosis en cada una de las versiones.

En este trabajo se estudiaron y compararon diferentes formas de calcular distribuciones de dosis en fantomas, utilizando las versiones de MCNP X 2.7.0, 5 1.6, 6 1.0 y 6 1.1 beta. Para realizar tal estudio, en primer lugar, se cuantificaron las diferencias en los resultados de las dosis obtenidas al realizar las simulaciones con las diferentes versiones de MCNP. En segundo lugar, se estudió la sensibilidad en los resultados al cambiar la semilla generadora de los números pseudoaleatorios utilizados para seguir la trayectoria de la partícula. Luego, se compararon los resultados de las dosis calculadas con diferentes tallies de MCNP. Finalmente, se estudiaron las diferencias en los resultados obtenidos al variar la composición del tejido, es decir, al utilizar diferentes bases de datos para la composición del tejido en el fantoma.

Los resultados obtenidos permitieron cuantificar las diferencias existentes al utilizar diferentes formas de cálculo para las distribuciones de dosis, determinando en qué casos tales diferencias eran significativas.

Otro de los objetivos de este trabajo fue el aprendizaje y uso de la herramienta MCNP, muy utilizada en BNCT y en cálculos de reactores nucleares. Este aprendizaje estuvo acompañado de una búsqueda bibliográfica relacionada al tema y del estudio de los fundamentos teóricos de la dosimetría y de los métodos Monte Carlo.

Finalmente, se puede tomar este trabajo como punto de partida para siguientes investigaciones en el tema, comparando y analizando diferencias bajo otras formas de cálculo de dosis y en otros fantomas de interés.

2. Introducción

En este capítulo se describen los fundamentos teóricos involucrados en el trabajo. En primer lugar, se mencionan los principios en los que se basa la Terapia por Captura Neutrónica en Boro. Luego, se detallan los fundamentos de la teoría de transporte de neutrones y del método Monte Carlo utilizado en el código MCNP. Finalmente, se listan las definiciones de las magnitudes físicas utilizadas para realizar los cálculos dosimétricos.

2.1. Terapia por Captura Neutrónica en Boro

La terapia por captura neutrónica en Boro o BNCT por sus siglas en inglés (Boron Neutron Capture Therapy) es una técnica experimental de radioterapia para tratar el cáncer. Es una terapia binaria que requiere la presencia e interacción de dos agentes. Uno de ellos es un compuesto con un isótopo estable de Boro (^{10}B) y el otro, un haz de neutrones de baja energía [1][2].

Existen diversos isótopos que permiten realizar una reacción de captura con neutrones de baja energía y varios de ellos con alta sección eficaz de captura, pero la elección del Boro-10 se debe, entre otras cosas, a que:

- No es un isótopo radiactivo.
- Se encuentra disponible en la naturaleza (abundancia ~20%).
- Las partículas emitidas por la reacción son de alta transferencia lineal de energía (LET).
- Se posee un buen conocimiento en lo que respecta a la química del boro.

Al generarse la reacción nuclear de captura neutrónica en el Boro 10 se producen dos reacciones como se muestra en la Fig. 2.1.

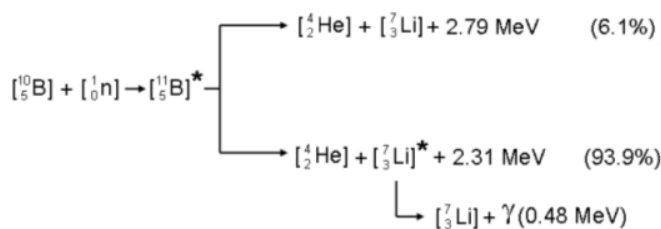


Fig. 2.1 - Reacción de captura neutrónica en el B-10 [3]

Si bien la sección eficaz microscópica del Boro-10 resulta varios órdenes de magnitud superior a la de los elementos que componen el tejido biológico, los efectos del Hidrógeno y del Nitrógeno no pueden ser despreciados debido a su alta concentración. Estos isótopos interactúan con los neutrones mediante las reacciones $[{}^{14}\text{N}(n,p){}^{14}\text{C}]$ y $[{}^1\text{H}(n,\gamma){}^2\text{H}]$, generando un aporte significativo a la dosis total absorbida. Dado que estas reacciones ocurren en todos los tejidos involucrados, se incrementa el daño producido en los tejidos sanos.

La interacción entre los neutrones y el Boro-10 genera partículas pesadas con alta LET (^4He y ^7Li), con un alcance aproximado de 8 μm y 5 μm respectivamente. Si se toma en cuenta que el diámetro promedio de una célula tumoral es de aproximadamente 10 μm , se puede inferir que el mayor efecto radiológico tendrá lugar dentro de las células cancerígenas que hayan capturado Boro-10.

Por este motivo, la efectividad del método se ve fuertemente influenciada por la posibilidad de distribuir el agente con Boro-10 en aquellas células cancerígenas de manera selectiva, homogénea y en cantidad adecuada. El compuesto portador del Boro-10 es desarrollado específicamente para cumplir este objetivo. Actualmente, las drogas utilizadas permiten obtener una concentración de 2 a 3 veces superior en las células tumorales que en las sanas. Esta posibilidad es la que hace de BNCT una terapia selectiva a nivel celular, permitiendo atacar las células malignas sin generar daño significativo en los otros tejidos.

La reacción fundamental de captura en Boro-10 se da para neutrones de energías menores a 0,5 eV (neutrones térmicos), por lo que es conveniente que el haz de irradiación esté dentro del espectro térmico y/o epitérmico dependiendo de la profundidad a la que se encuentre el tumor. Sin embargo, resulta técnicamente imposible evitar la presencia de radiación gamma y de neutrones de mayor energía dentro del haz [4]. Esto genera un efecto no deseado, ya que estas partículas pueden depositar su energía en el tejido sano.

Teniendo en cuenta estos requerimientos, los reactores nucleares (Fig. 2.2 y Fig. 2.3) se presentan como una buena fuente de neutrones para este tratamiento, por sobre otros tipos como las fuentes de Californio-252 y Americio-Berilio. Otra de las variantes a los reactores nucleares, es la utilización de fuentes basadas en acelerados.

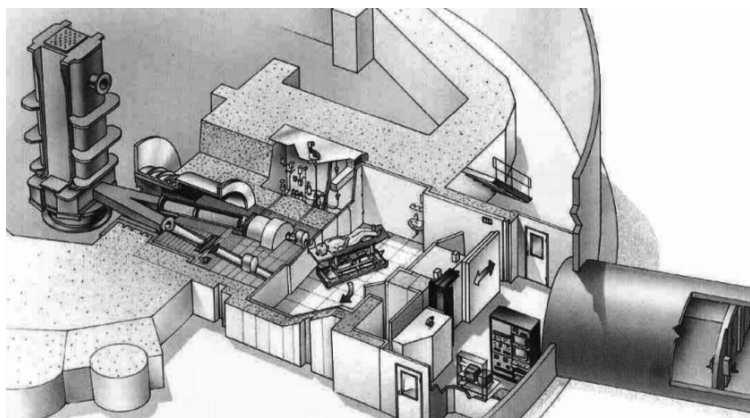


Fig. 2.2 - Esquema de la facilidad de irradiación del HFR (High Flux Reactor) en Petten Holanda [3]

Con el diseño de blindajes apropiados, se pueden obtener haces adecuados con baja presencia de gammas y de neutrones de alta energía (Fig. 2.3). Se debe tener en cuenta que, si sólo se cuenta con neutrones térmicos, el haz resultará útil únicamente para tratamientos superficiales, ya que los neutrones interactuarán antes de llegar a la zona de mayor profundidad (debido a la mayor probabilidad de interacción en el rango térmico). Cuando los tumores a tratar no sean superficiales, resultará conveniente la utilización de un haz epitérmico, entre 0,5 eV y 20 KeV, para mejorar la efectividad a cierta profundidad.

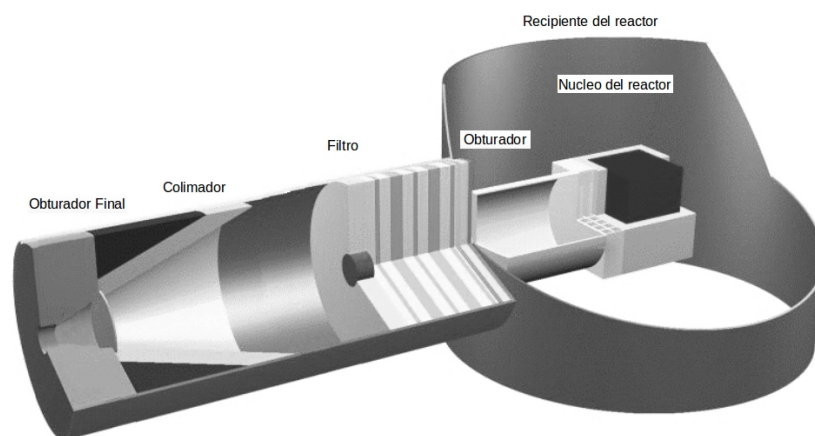


Fig. 2.3 - Esquema de una facilidad de irradiación [3]

En lo que respecta a la historia de esta terapia, en el año 1935 Taylor y Goldhaber describieron la interacción $^{10}\text{B}(n,\alpha)^7\text{Li}$, [5] y Locher, del Instituto Franklin de Pennsylvania, propuso en 1936, la utilización de radiación neutrónica para el tratamiento de cáncer basado en el concepto de captura neutrónica (NCT) [6].

Las primeras aplicaciones clínicas sobre humanos fueron realizadas en el Massachusetts General Hospital de la Universidad de Harvard para el tratamiento de tumores en el cerebro. Este trabajo fue llevado adelante por Sweet entre 1951 y 1961 [7]. Los resultados de estos estudios no fueron exitosos debido a la falta de un haz neutrónico adecuado y de compuestos de Boro-10 que permitieran obtener una alta concentración en la zona tumoral, junto con la imposibilidad de realizar una detección temprana del tumor.

Luego de capacitarse en EEUU, Hatanaka continuó desarrollando la técnica BNCT desde Japón en 1968 [8]. Se introdujo el uso de fuentes térmicas de neutrones (haz de un reactor experimental) en conjunto con la implementación del borocaptato de sodio – BSH (Fig. 2.4), lo que permitió que el método resulte más selectivo. Con estos avances se lograron tratar más de 200 pacientes (con resultados prometedores) en intervenciones a cráneo descubierto para tratar tumores cerebrales. Por otro lado, en 1987, Mishima utilizó la borofenil alanina – BPA (Fig. 2.5) como el compuesto que aporta Boro-10 para el tratamiento de tumores superficiales [9].

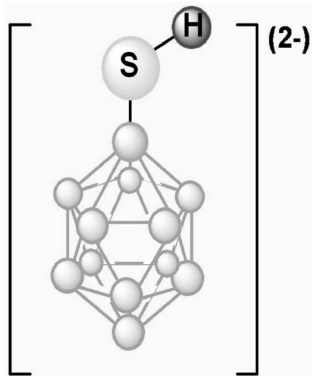


Fig. 2.4 - Representación del BSH [3]

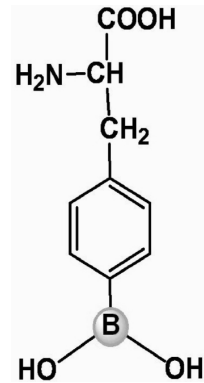


Fig. 2.5 - Representación del BPA [3]

En la actualidad, BNCT es utilizado principalmente en Japón para tumores cerebrales malignos. En Europa y Argentina [10] también se obtuvieron resultados prometedores para melanomas ubicados en distintas zonas, mientras que en Italia se estudió una aplicación para los casos de metástasis en el hígado de cáncer de colon [3] y en Estados Unidos para tratamientos de tumores en cabeza y cuello. Actualmente también hay grupos de trabajo, entre otros, en Taiwán y China. Hoy en día, en Argentina hay grupos de investigación en las diferentes áreas que involucra BNCT.

Por el momento, este tipo de terapia se mostró más efectiva que las terapias convencionales, en ciertos casos (melanoma y glioblastoma). Esta tipo de tratamiento, al estar aún en desarrollo, cuenta con gran capacidad de mejoras y perfeccionamiento. Algunos de sus beneficios a destacar son su posibilidad de atacar células no visibles, células resistentes a la radiación de baja LET y la posibilidad de entregar dosis de 60/70 Gy, mientras que en la irradiación externa por haz de fotones se necesitan 6/7 semanas para obtener esa dosis [3].



Fig. 2.6 - Reactor RA-6

En nuestro país se realizó el diseño y construcción de un haz de neutrones epitérmico adecuado en el reactor RA-6 (Fig. 2.6) del Centro Atómico Bariloche para su uso en este tipo de terapia [11]. Esta instalación cuenta con una sala de tratamiento (Fig. 2.7) con los requerimientos clínicos necesarios (única en Latinoamérica). El 8 de octubre de 2003 se realizó el primer estudio clínico en el país, sumando a la fecha ocho irradiaciones por BNCT.

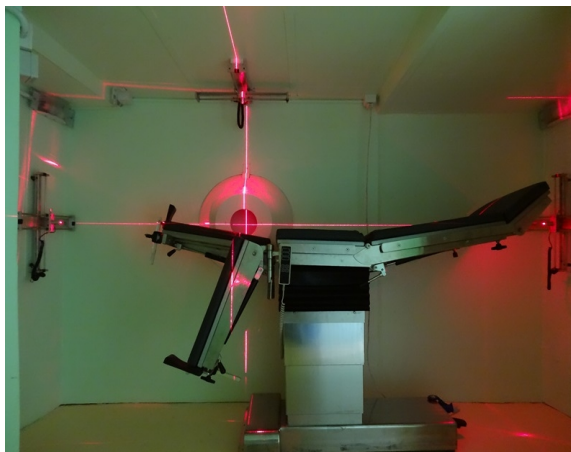


Fig. 2.7 - Facilidad de irradiación para BNCT del RA-6

2.2. Transporte de partículas y Métodos Monte Carlo

Para realizar los cálculos dosimétricos en BNCT es necesario conocer los fundamentos del transporte que se simulan en MCNP con métodos Monte Carlo. A continuación se describen los principios del transporte de partículas junto con los de los métodos Monte Carlo.

2.2.1. Unidades y medidas [12]

Fluencia de partículas (ϕ): Es el número de partículas que atraviesan una superficie por unidad de área.

$$\phi = \frac{dN}{da} \left[\frac{1}{\text{cm}^2} \right]$$

Flujo o densidad de flujo (φ): Representa la variación de la fluencia en el tiempo.

$$\varphi = \frac{d\phi}{dt} \left[\frac{1}{\text{cm}^2 \text{ s}} \right]$$

Ángulo sólido $\hat{\Omega}$: Vector unitario en dirección del movimiento, donde $V(E)$ es el vector velocidad de la partícula.

$$\hat{\Omega} = \frac{V(E)}{|V(E)|}$$

Flujo neutrónico angular ψ : Cantidad de neutrones en un volumen diferencial, asociado a un diferencial de energía en dE y un diferencial de ángulo sólido $d\hat{\Omega}$, en el tiempo t .

$$\psi(r, E, \Omega, t) dr dE d\hat{\Omega}$$

Flujo neutrónico escalar ϕ : Cantidad de neutrones por unidad de área en un diferencial dr , asociado a un diferencial de energía dE en el tiempo t .

$$\phi(r, E, t) dr dE = \int_{4\pi} \psi(r, E, \Omega, t) dr dE d\hat{\Omega}$$

2.2.2. Ecuación de Boltzmann [13][14][15]

Las bases del transporte radican en la ecuación de Boltzmann. Ésta fue desarrollada a principios del siglo XIX durante el estudio de la teoría cinética de gases.

En la década de 1940, con la invención de los reactores nucleares, su teoría y ecuación se comenzaron a aplicar nuevamente. Este modelo ha jugado un papel crucial en la teoría del reactor, ya que es lo suficientemente simple como para permitir una visión científica, y lo suficientemente realista para estudiar muchos problemas de diseño relevantes en los primeros reactores.

Esta ecuación describe el movimiento de los neutrones. Por este motivo es de interés su resolución, al permitir conocer la distribución de flujo en un dado caso de estudio planteado. Inicialmente, esto se aplicó a sistemas de geometrías simples y aproximadas, pero hoy en día, la evolución de las computadoras permitió el enfoque numérico del transporte.

En una versión simplificada, la ecuación de Boltzmann plantea el balance y conservación de neutrones. Cada uno de los términos representa una ganancia o una pérdida de partículas, mientras que el saldo toma en cuenta los que se ganan o pierden dentro del volumen de control estudiado.

Existen varias formas de la ecuación de transporte de neutrones. La formulación integro-diferencial es la más difundida en aplicaciones de transporte de neutrones y física de reactores. Se presenta a continuación la ecuación de transporte de neutrones:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \psi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \\ & \frac{\chi_p(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \nu_p(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) + \sum_{i=1}^N \frac{\chi_{di}(E)}{4\pi} \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \\ & \int_{4\pi} d\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t) \psi(\mathbf{r}, E', \hat{\Omega}', t) + s(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) \end{aligned}$$

Donde:

\mathbf{r} : Vector posición

E : Energía

$\mathbf{v}(E)$: Vector velocidad

t : Tiempo

ν_p : Número promedio de neutrones instantáneos producidos en la fisión.

$\chi_p(E)$: Distribución del espectro de fisión de neutrones instantáneos.

$\chi_{di}(E)$: Distribución del espectro de neutrones retardados.

$\Sigma_t(r, E, t)$: Sección eficaz macroscópica total.

$\Sigma_f(r, E', t)$: Sección eficaz macroscópica de fisión.

$\Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega, t) dE' d\Omega'$: Sección eficaz macroscópica doble diferencial de scattering.

N : Número de precursores de neutrones retardados.

λ_i : Constante de decaimiento del precursor i .

$C_i(r, t)$: Cantidad de precursores i (de neutrones retardados) en el punto r en el tiempo t .

$s(r, E, \Omega, t)$: Fuente externa.

El primer término representa la tasa de cambio en el tiempo de neutrones, el segundo término describe el movimiento de los neutrones dentro o fuera del volumen de control. El tercer término representa todos los neutrones que se pierde por absorción y scattering.

El primer término del lado derecho del signo igual representa la producción de neutrones debido a la fisión. El segundo, representa la aparición de neutrones por efectos retardados, el tercero representa aquellos neutrones que aparecen en el rango de energía producto de una interacción de scattering. Por último, el cuarto término representa una fuente externa genérica.

Debido a la complejidad para resolver analíticamente esta ecuación, existen diferentes simplificaciones. Una de ellas consiste en utilizar la aproximación de difusión y resolver la ecuación de manera determinista.

Los métodos Monte Carlo, en cambio, no resuelven la ecuación sino que siguiendo el camino de las partículas permiten llegar a los resultados. En la siguiente sección se describen los fundamentos de tales métodos.

2.2.3. Métodos Monte Carlo

Estos son métodos estadísticos (no determinísticos) que permiten obtener soluciones a ciertos problemas matemáticos mediante la simulación de experimentos reales con un muestreo de números pseudoaleatorios.

2.2.3.1. Reseña histórica

Los métodos Monte Carlo deben su nombre a la conocida ciudad de Mónaco y a sus casinos, en donde se juega a la clásica "ruleta" y se generan resultados aleatorios.

El mayor interés por estos métodos surge en 1944 en el Laboratorio Nacional de Los Álamos en Estados Unidos, en marco del proyecto Manhattan de desarrollo de la bomba atómica. En la década de 1970, los desarrollos en el campo computacional permitieron incrementar la complejidad de las estimaciones y así llegar a resultados más precisos. En la Ingeniería Nuclear estos métodos se comenzaron a aplicar principalmente en problemas complejos de blindaje y también en el contraste de los cálculos deterministas.

Actualmente los métodos se encuentran implementados en el software MCNP, desarrollado por el Laboratorio Nacional de Los Álamos (E.E.U.U.). Este se utiliza en diversas áreas como pueden ser: desarrollo de reactores nucleares, radioterapia y cálculo de blindajes entre otros.

2.3.3.2. Resolución por Monte Carlo [16][17]

La solución determinística de un sistema físico se basa en la posibilidad de modelar y resolver analíticamente el sistema. En ciertos casos donde la complejidad lo dificulta, se puede obtener los resultados mediante la simulación de la trayectoria de las partículas, evitando la necesidad de la resolución del sistema de ecuaciones completo. En la Fig. 2.8 se comparan los tiempos de resolución entre los métodos determinísticos y los métodos Monte Carlo. Se observa que para geometrías complejas y para problemas reales resulta conveniente la resolución mediante métodos estadísticos. Sin embargo, para que esto sea posible, es requisito que el sistema físico-matemático pueda ser descrito por funciones de densidad de probabilidad.

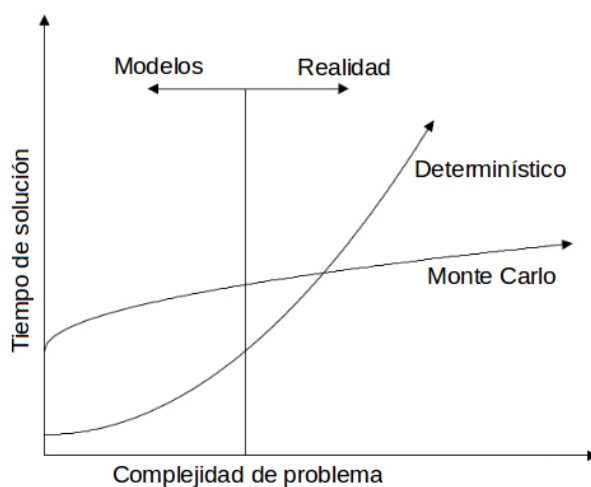


Fig. 2.8 - Comparación de resoluciones deterministas y por Monte Carlo [16]

Las bases de los métodos estadísticos se encuentran en la teoría de probabilidades y estadística, a partir de la cual se plantea la necesidad de tomar una muestra de gran tamaño (simulación de muchos casos aleatorios) para obtener resultados con una buena confiabilidad y bajo error estadístico. También es necesario que los datos nucleares que representan la física del problema sean lo más realistas posibles para que los resultados sean confiables.

Otra de las bases consiste en la generación de los números aleatorios que definen la simulación. Estos números, al ser generados por un programa según un dado algoritmo, en realidad los números son pseudoaleatorios.

Para la confiabilidad del método resulta de gran importancia que cada número sea independiente del resto. Esto implica que su algoritmo de generación debe ser de buena calidad, permitiendo así que la secuencia sea lo más "aleatoria" posible. Esto se logra si se genera una distribución uniforme y se evita la repetición de los números que lleve a la generación de correlaciones.

La simulación en si, consiste en obtener resultados estadísticos para las variables físicas del problema (distancia recorrida, posición, energía, tipo de interacción, etc.) a través de una muestra apropiada. Por ejemplo, para determinar la distancia a recorrer por el neutrón (en un medio homogéneo) hasta su próxima colisión, se sortea un valor aleatorio (λ , tal que $0 < \lambda < 1$) para la distribución acumulada de probabilidad de interacción $f(x)$.

$$f(x) = \int_0^x p(l) dl = \int_0^x \Sigma_T e^{-\Sigma_T l} dl = \lambda$$

donde $p(l)$ es la función de distribución de probabilidad de interacción a la distancia l y Σ_T es la sección eficaz total de interacción. A partir de esto se resuelve y se obtiene la distancia x que recorrerá el neutrón hasta su próxima interacción.

$$1 - e^{-\Sigma_T x} = \lambda \quad \Rightarrow \quad x = \frac{-\ln(1-\lambda)}{\Sigma_T}$$

Otro caso relevante consiste en la determinación del tipo de reacción que ocurre. En este caso se confecciona una función de distribución de probabilidades en base a las secciones eficaces. Donde, por ejemplo, el cociente σ_s / σ_t representa la probabilidad de que la interacción sea una dispersión elástica.

El esquema de Simulación por Monte Carlo se basa en:

- Definición de variables aleatorias en el caso de estudio y sus funciones de distribución de probabilidad.
- Generación de un número aleatorio (0-1).
- Determinación del valor de la variable en base al número generado y a su distribución de probabilidad.
- Iteración.
- Recopilación de resultados y análisis estadístico.

Al utilizar este método, que toma un número determinado de variables de muestreo para la simulación, existe un cierto error estadístico que representa, en cierta medida, la confiabilidad de los resultados obtenidos. Este parámetro es calculado por los programas de simulación en base a la cantidad de partículas simuladas y al desvío estándar. Cabe destacar que el error relativo es proporcional a $1/\sqrt{N}$, es decir, cuanto mayor número de partículas simuladas menor será el error del cálculo.

2.3.3.3. Transporte de partículas en Monte Carlo [16][17]

Existen dos opciones básicas al momento de simular y modelizar el transporte de neutrones. Los métodos deterministas resuelven la ecuación de transporte de Boltzmann de una manera aproximada numéricamente a lo largo de un sistema modelado. Por otro lado, los métodos estocásticos (como los aplicados con Monte Carlo) modelan el sistema nuclear mucho más precisamente y se resuelve estadísticamente.

Los métodos estocásticos, para simular el experimento real, utilizan algún método de secuencia de números aleatorios para realizar la simulación. En la mayoría de los métodos de este tipo, el proceso físico se simula directamente y no hay necesidad de escribir ecuaciones diferenciales que describan el comportamiento del sistema. Este es considerado el método más preciso para la simulación del transporte de partículas y en particular de neutrones. Esto se debe al alto grado de detalle con el que se considera la distribución energética, las interacciones, la geometría y la trayectoria que siguen los neutrones en el medio.

Los procesos que se involucran en el transporte son de naturaleza estocástica. Esto quiere decir que no se puede prever qué tipo de interacción se va a producir, solo se pueden asignar probabilidades a cada posible suceso. Motivo por el cual, Monte Carlo no resuelve realmente la ecuación, sino que lo simula el transporte. Para todo evento se genera un número aleatorio en base al cual, junto a las funciones de distribución de probabilidad, se define el tipo de interacción y otros parámetros necesarios.

La simulación sigue todos los eventos o interacciones que sufre cada partícula (las creadas por la fuente y las que aparecen en las interacciones) desde su origen hasta que alcanza una condición terminal requerida (Fig. 2.9), ya sea por absorción, escape, etc. Luego, se calcula el valor esperado de todos los eventos simulados, lo que resulta equivalente al valor de la cantidad física del sistema en estudio.

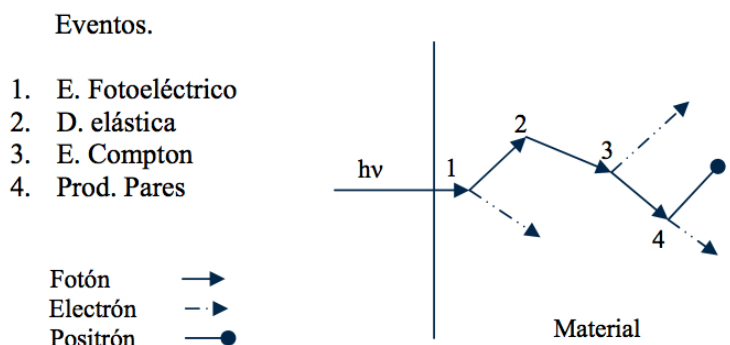


Fig. 2.9 - Esquema de la historia de un fotón al incidir en un material

La historia de una partícula se inicia con el cálculo (según el proceso aleatorio de probabilidad y las características del problema planteado) de la creación de una partícula, obteniendo así su energía, posición y dirección de la trayectoria. Se continúa por la distancia libre que recorrerá antes de interactuar y el tipo de colisión que realizará. La energía y dirección de las partículas dispersadas y secundarias son variables aleatorias que también se calculan en la simulación.

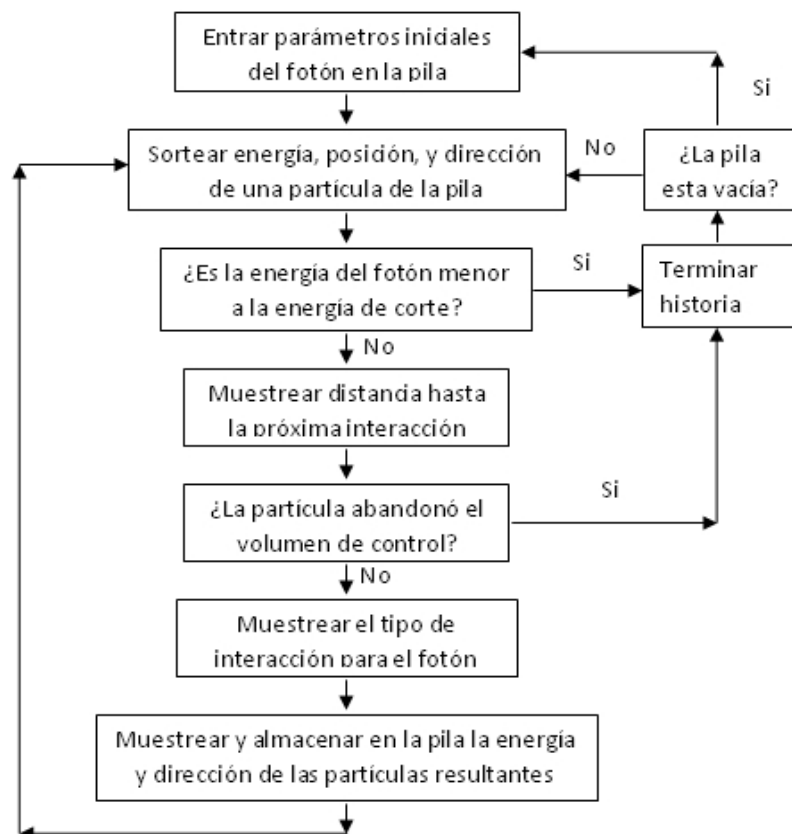


Fig. 2.10 - Esquema del proceso de simulación de transporte de un fotón [16]

El proceso continúa para cada una de las partículas generadas por la fuente y también para las partículas secundarias, hasta que se alcanza una condición terminal (Fig. 2.10). Siendo posible obtener con este método la trayectoria de las partículas a través del medio (Fig. 2.11).

Se puede dar el caso en que la interacción resultante sea una dispersión, por lo tanto la partícula sufrirá un cambio de su energía y dirección. Estas variaciones también son procesos estadísticos, es decir, no hay una única energía y dirección posible después de la dispersión. Las variables principales de cada partícula que permiten seguir su trayectoria son: su posición espacial (Fig. 2.11), su dirección (Fig. 2.12) y su energía.

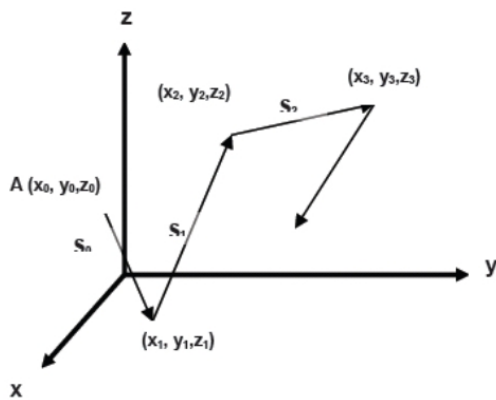


Fig. 2.11 - Trayectoria de una partícula en un medio

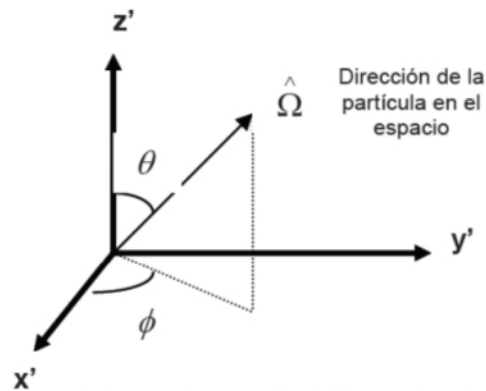


Fig. 2.12 - Dirección de una partícula en un medio

Las partículas iniciales dependerán únicamente de las propiedades de la fuente impuesta en el modelo. Luego de la primera interacción las partículas iniciales y las secundarias (de ser generadas) tendrán un nuevo estado. Este será dependiente del estado previo y de las leyes de dispersión en el material de estudio.

2.3.3.4. MCNP

El código MCNP (Monte Carlo N-Particle) es un programa desarrollado por el Laboratorio Nacional de Los Álamos (E.E.U.U.). Actualmente es uno de los programas más completo y difundido basado en estos métodos.

Para correr una simulación se debe crear un archivo de entrada o input (ver anexo). En este archivo se indican los parámetros de la simulación como materiales, geometría, datos nucleares a utilizar, tipo de fuente, datos a calcular (tallies), etc. Entre los tallies más comunes se pueden mencionar el flujo de partículas y deposición energía.

Finalmente, al ejecutar el programa, se leerán las instrucciones del input, se lo simulará e imprimirán los resultados en un archivo de salida.

En este trabajo se utilizaron las versiones de MCNP X 2.7.0 [18], 5 1.6 [19], 6 1.0 [20] y 6 1.1 beta [21], para obtener distribuciones de dosis en fantomas. A continuación se presentan los principios teóricos de la dosimetría.

2.4. Dosimetría

Con el empleo de las primeras fuentes radioactivas se puso de manifiesto la necesidad de conocer y caracterizar los efectos inducidos por la radiación al interactuar con un medio dado (especialmente en el tejido vivo).

Existen organismos internacionales que tienen como objetivo de estudio la protección frente a la radiación. Algunos de estos organismos son: ICRP (International Commission on Radiological Protection), ICRU (International Commission on Radiation Units and Measurements), IAEA (International Atomic Energy Agency) y UNSCEAR (United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation).

Para el estudio de los efectos radio-inducidos es de importancia lograr comprender el proceso físico básico que ocurre con la interacción [12]:

- Al penetrar en un medio la radiación interactúa con los átomos de este, cediendo parte de su energía al tejido en cada colisión.
- Esta energía depositada induce una serie de efectos fisicoquímicos (rotura de moléculas, creación de radicales libres, etc.).
- Dichos efectos son de gran complejidad y conducen a alteraciones o destrucciones de las células (efecto biológico), redes cristalinas o cadenas moleculares (efecto de fragilización de materiales).

En las siguientes secciones se describirán las definiciones de los conceptos involucrados en un estudio dosimétrico.

2.4.1. Unidades y medidas [12] [22]

Fluencia de energía (ψ): Energía de la radiación incidente por unidad de área que atraviesa.

$$\psi = \frac{dE}{da} \left[\frac{J}{cm^2} \right]$$

Flujo de energía o tasa de fluencia de energía (Ψ): Variación temporal de la fluencia de energía.

$$\Psi = \frac{d\psi}{dt} \left[\frac{J}{cm^2 s} \right]$$

Energía impartida (ϵ): Expresa la energía que ha sido absorbida por el medio. Ésta puede ser proveniente, tanto de la radiación incidente como de la resultante de reacciones nucleares inducidas por la radiación en el medio. Resulta una variable de naturaleza aleatoria.

Dosis absorbida (D): Representa el valor medio de energía impartida por unidad de masa en un dado volumen de control. Tanto $\bar{\epsilon}$ como D serán dependientes del tipo de radiación, su intensidad y el material irradiado.

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm} \left[\frac{J}{kg} \right] = [Gy]$$

Tasa de dosis \dot{D} :

$$\dot{D} = \frac{dD}{dt} \left[\frac{Gy}{s} \right]$$

KERMA (Kinetic Energy Released per unit Mass): Se define como la energía cinética transferida por unidad de masa y se corresponde con la suma de las energías cinéticas iniciales de las partículas cargadas puestas en movimiento por radiación indirectamente ionizante, generalmente fotones y neutrones.

Coefficiente de atenuación lineal μ [1/cm] determina como se atenúa un haz de fotones al atravesar un dado espesor de material según la ecuación:

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

donde:

$$\mu = n \cdot \sigma$$

n : átomos por unidad de volumen

σ : sección eficaz total de interacción de los fotones con la materia.

El coeficiente representa la fracción de fotones removidos por unidad de espesor y esta asociado a la energía de los fotones que interactúan.

Coefficiente de transferencia de energía μ_{Tr} [1/cm]: Al interactuar un fotón, toda o parte de su energía es convertida en energía cinética de electrones por efecto fotoeléctrico, Compton o creación de pares. El coeficiente representa esta fracción de energía transferida del fotón a los electrones, por unidad de espesor.

Coefficiente de absorción de energía μ_{En} [1/cm]: Los electrones que fueron puestos en movimiento por los fotones incidentes perderán su energía en el medio por colisiones elásticas y por bremsstrahlung. En este último caso se pierde energía de la forma radiante del diferencial de volumen a estudiar, por lo que la absorción se diferencia de la transferencia en la fracción que se pierde por radiación.

2.4.2. Dosis por fotones

Al evaluar la dosis por fotones se debe tener en cuenta que no toda la energía transferida en un volumen de control es necesariamente absorbida. Esto se debe a que parte de la energía transferida se transforma en energía radiante que abandona el volumen de control en estudio. Dado que el KERMA esta asociado a la energía transferida y la dosis a la absorbida, el KERMA resultara mayor que la Dosis.

Solo en el caso que se plantee el equilibrio de partículas cargadas en el volumen de control de estudio se puede decir que el KERMA es numéricamente igual a la dosis. Este equilibrio implica que la energía cinética de las partículas cargadas que entran a un volumen infinitesimal del material irradiado iguala la energía cinética de las partículas cargadas que escapan del volumen.

La dosis frente a una irradiación de fotones se puede obtener, planteando el equilibrio electrónico, a partir de la fluencia de partículas o de energía según:

$$D_{\gamma} = \int_0^{E_{max}} \psi_{\gamma} \frac{\mu_{en}}{\rho}(E) dE = \int_0^{E_{max}} \phi_{\gamma}(E) \frac{\mu_{en}}{\rho}(E) E_{\gamma} dE$$

$$D_{\gamma} = \int_0^{E_{max}} \phi_{\gamma}(E) K_{\gamma}(E) dE$$

donde K es el coeficiente de KERMA (para fotones).

2.4.3. Dosis por neutrones

La dosis absorbida producto de los neutrones se calcula en base a los coeficientes de KERMA para neutrones,

$$D_n = \int_0^{E_{max}} \phi_n(E) K_n(E) dE$$

En el caso de los neutrones, el coeficiente K_n se deduce de las secciones eficaces microscópicas de cada nucleído.

$$K_n = \sum_j N_j \sum_i \epsilon_{ij}(E) \times \sigma_{ij}(E)$$

donde j es el tipo de nucleído e i el tipo de reacción, N es el numero de átomos por unidad de masa, ϵ y σ son la energía media transferida a partículas cargadas y la sección eficaz en la reacción i del nucleído j respectivamente.

Se puede apreciar en el método de cálculo que, para la realización de los cálculos dosimétricos, se debe contar tanto con el espectro de energía de los neutrones y fotones que inciden en el blanco como el coeficiente de KERMA. Este coeficiente deberá tener en cuenta la composición específica del blanco y será una función de la energía de la partícula incidente [23].

2.4.4. Análisis Dosimétrico

En los estudios dosimétricos se deben obtener distintas distribuciones de dosis cuando se modifica el haz de irradiación, para así obtener las mejores combinaciones posibles según el objetivo deseado.

Una herramienta típica en estos estudios resulta la dosis normalizada definida como:

$$D_{norm} = 100 \times \frac{D(x)}{D(x_{Ref})},$$

donde $D(x)$ es la dosis a lo largo del eje central del haz a una profundidad x , y $D(x_{Ref})$ es la dosis en un punto considerado como referencia Fig. 2.13. Este punto se lo toma en donde se encuentra el máximo de dosis.

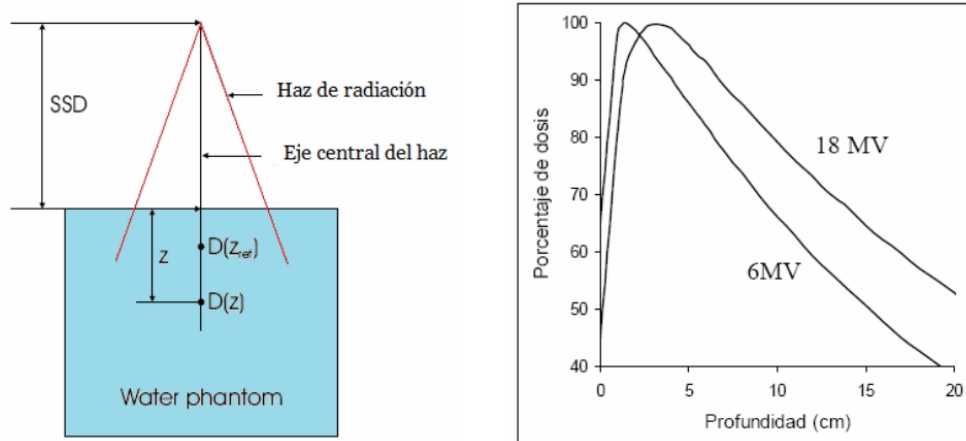


Fig. 2.13 - Ejemplos de la modelación y perfiles de dosis normalizados (para diferentes energías)

En los cálculos que se realizan con BNCT para estudiar las distribuciones de dosis, se utilizan los perfiles de dosis en profundidad en el fantoma como una herramienta sencilla para el análisis que se quiera realizar.

3. Métodos y Materiales

Para realizar los cálculos de distribución de dosis propuestos en este trabajo, se utilizaron las versiones X 2.7.0 [18], 5 1.6 [19], 6 1.0 [20] y 6 1.1 beta [21] del programa MCNP. El modelo estudiado consistió en un fantoma cúbico de 60 cm de lado (Fig. 3.1).

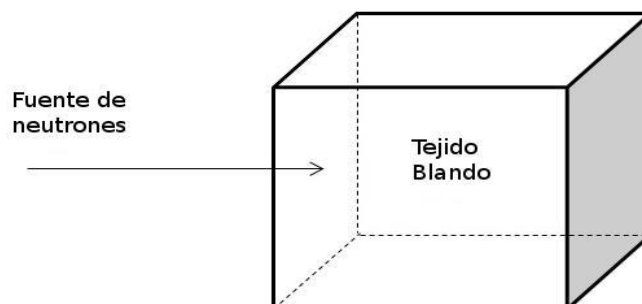


Fig. 3.1 - Modelo del fantoma

La composición del tejido modelado es la del tejido blando para el hombre de referencia propuesto en ICRU 44 [24] y 46 [25]. Se presenta el detalle en la Tabla 3.1.

Elemento	% másico
Hidrógeno	10,5
Carbono	25,6
Nitrógeno	2,7
Oxígeno	60,2
Sódio	0,1
Fósforo	0,2
Azufre	0,3
Cloro	0,2
Potasio	0,2

Tabla 3.1 - Composición del fantoma

La fuente de neutrones utilizada en la modelización es fija, mono direccional (axial al fantoma) y tiene 8 cm de radio. Tiene una dependencia energética de la forma $1/E$ en el rango epitérmico. Los límites de la fuente van desde $4E-7$ MeV hasta $1E-2$ MeV.

Para los cálculos de los tallies de flujo y deposición de energía se utilizaron detectores sobre el eje del fantoma. Estos consistieron en esferas de 0,25 cm de radio.

En base a la configuración descrita se realizaron diferentes estudios comparativos, siempre para la misma cantidad de partículas corridas (1×10^8) y para la misma semilla inicial (valor por defecto). La computadora utilizada para

estas simulaciones cuenta con un procesador Intel Core 2 Quad, CPU Q8400 2,66GHzx4, 3,7GB de memoria RAM y sistema operativo Ubuntu 14,04 LTS 64bits. Los estudios realizados se detallan a continuación:

3.1. Comparación MCNP X, 5, 6 y 6 beta

Un mismo modelo de input fue corrido con las diferentes versiones de MCNP X 2.7.0 [18], 5 1.6 [19], 6 1.0 [20] y 6 1.1 beta [21] con el fin de evaluar las diferencias entre los modelos.

Se realizaron los cálculos de los perfiles axiales para el flujo de neutrones térmicos [n/cm^2] (fundamental para el cálculo de dosis por neutrones) y la deposición de energía [MeV/g] por parte de los fotones, utilizando las funciones o tallies F4:n y F6:p, respectivamente.

En las corridas analizadas también se evaluaron los diferentes tiempos de cálculo que necesitó cada versión del programa junto con el Factor de Mérito (FOM – Figure Of Merit), que toma en cuenta el Computer Time (t_{CT}) y el error estadístico de la simulación (E_r).

$$FOM = \frac{1}{t_{CT} \times E_r^2}$$

Los tiempos evaluados son el Computer Time (t_{CT}), que es el tiempo computacional total para la corrida del problema, incluyendo la iniciación, compilación e impresión de datos de salida. El CTM, en cambio, es el tiempo utilizado por el programa en la resolución del transporte de las partículas. El tiempo real es calculado según el horario de inicio y fin de cada corrida.

3.2. Comparación de semillas (MCNP 6)

El programa inicia la simulación a partir de una semilla con la cual comienza la generación de los números pseudoaleatorios. Este valor es un número prefijado por defecto (5^{19}). Se realizó una corrida comparativa con una semilla arbitraria diferente para el mismo input y la misma cantidad de partículas (1×10^8). Se contrastan los resultados obtenidos para el flujo neutrónico y para la deposición de energía por parte de los fotones.

3.3. Comparación de Tallies (MCNP 6)

Se calcularon los perfiles de dosis en el fantoma utilizando dos tallies diferentes en MCNP, el F4 (con tablas de coeficientes de KERMA) y el F6 (utilizando tablas de MCNP), ambos aplicados a neutrones y fotones. Se obtuvieron dos perfiles de dosis diferentes, uno para cada tally.

El tally F6 calcula la deposición de energía promedio [MeV/g] en el detector. Por otro lado, como se ve en las fórmulas a continuación, el F4 (flujo) multiplicado por los coeficientes de KERMA da como resultado el KERMA [MeV]. Este KERMA resulta numericamente igual a la dosis cuando se cumple la condición de equilibrio de partículas cargadas (ver sección 2.4.2). Al conocer la masa de tejido en el detector se puede obtener la energía por unidad de masa para comparar con el tally F6,

$$D_{\gamma} = K_{\gamma} \times \phi_{\gamma} ,$$

$$D = K_n \times \phi ,$$

donde D , K_n y ϕ son la dosis, coeficiente de KERMA y flujo para neutrones respectivamente. Por otro lado, D_{γ} , K_{γ} y ϕ_{γ} son la dosis, coeficiente de KERMA y flujo para los fotones respectivamente.

Los coeficientes de KERMA utilizados se obtienen, para los fotones, a partir de la energía y del coeficiente másico de absorción de energía (μ_{en}/ρ) según la ecuación:

$$K_{\gamma}(E) = E \times \lambda \times \left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{Total}(E) = E \times \lambda \times \sum_i w_i \times \left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_i(E)$$

$$\lambda = 1,602 \times 10^{-10} \frac{Gyg}{MeV}$$

Donde:

λ : Constante de cambio de unidades

E : Energía del fotón [MeV]

$(\mu_{en}/\rho)_{Total}$: Coeficiente de absorción másico del tejido [cm^2/g]

w_i : Proporción en peso del elemento i que compone al tejido

$(\mu_{en}/\rho)_i$: Coeficiente de absorción másico [cm^2/g] del elemento i

En la Fig. 3.2 se muestran los coeficientes de absorción másico [26] de los principales elementos que componen el tejido y el total calculado para fotones.

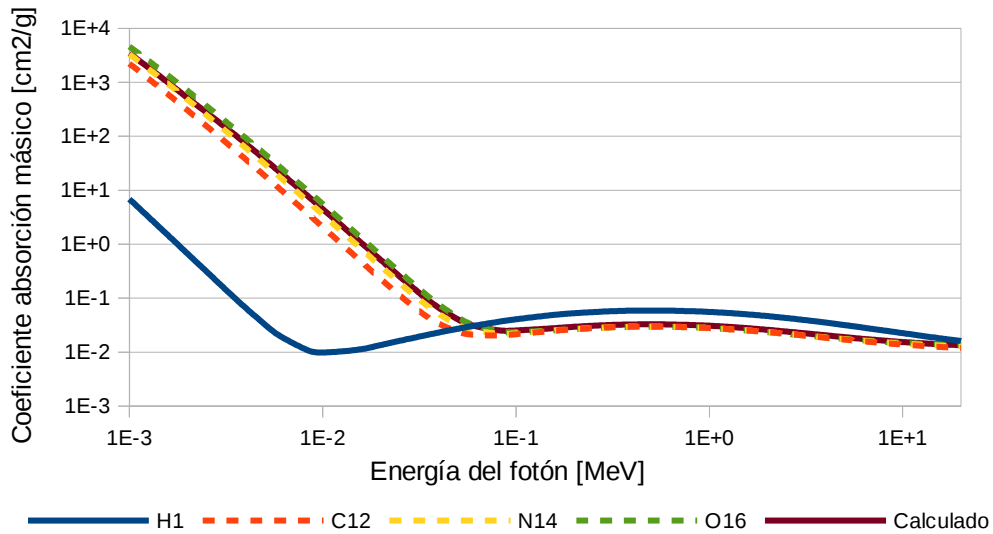


Fig. 3.2 - Coeficientes de absorción másico

Los coeficientes de KERMA para el caso de los neutrones, se obtienen con un procedimiento similar al de los fotones. Se utiliza la base de datos [27] y se aplica la siguiente fórmula:

$$K_n(E) = \sum_i w_i \times K_n(E)$$

donde:

K_i : Coeficiente de KERMA para el elemento i

w_i : Proporción en peso del elemento i que compone al tejido

En la Fig. 3.3 se observan los coeficientes de los elementos principales que componen el tejido y el coeficiente total para neutrones.

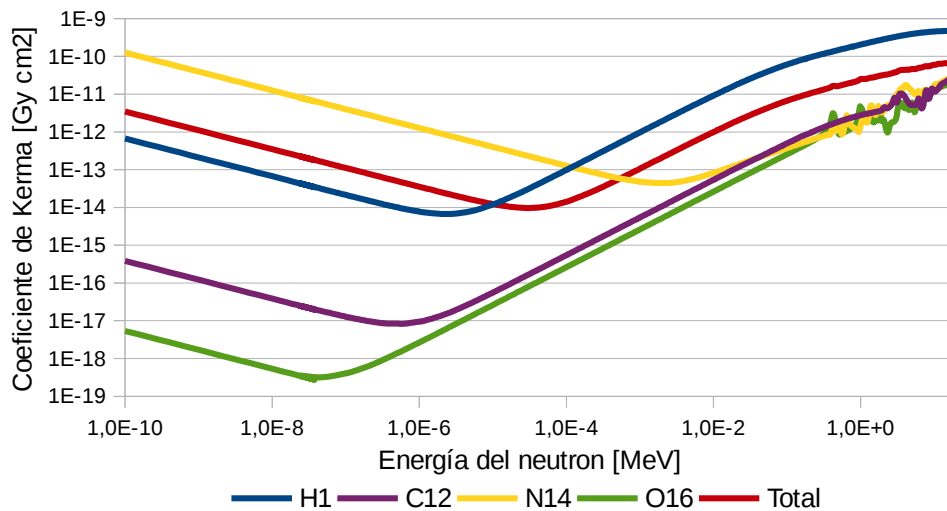


Fig. 3.4 - Coeficientes de KERMA para neutrones

3.4. Comparación de composición del fantoma (MCNP 6)

La composición del tejido tiene un peso importante dentro del cálculo dosimétrico. Esta no sólo cambia los elementos y sus proporciones, sino que también afecta los factores de KERMA. Por este motivo se evalúa la dosis por neutrones en el fantoma de tejido blando, pero variando su composición según otros autores ICRP 1975 [28] y Kerr [29]. En la Tabla 3.2 se presenta el detalle de la composición y el contraste con la composición anterior.

Elemento	ICRU % másico	ICRP	Diferencia respecto ICRU
Hidrógeno	10,500	10,514	0,014
Carbono	25,600	22,631	-2,969
Nitrógeno	2,700	2,339	-0,361
Oxígeno	60,200	63,686	3,486
Sodio	0,100	0,114	0,014
Magnesio	-	0,013	0,013
Fósforo	0,200	0,134	-0,066
Azufre	0,300	0,202	-0,098
Cloro	0,200	0,136	-0,064
Potasio	0,200	0,202	0,002
Calcio	-	0,024	0,024
Hierro	-	0,006	0,006

Tabla 3.2 - Composición del nuevo fantoma

Inicialmente se realiza una comparación de la deposición de energía (F6) por fotones, y luego se calcula la dosis por medio del flujo (F4) y los coeficientes de KERMA. Para este último caso, se utilizan factores de KERMA ya compuestos según las bases de datos DS02 y DS86 [29] y para el tejido inicial, se utilizan los coeficientes de KERMA confeccionados según se detalló en la sección 3.3 (Goorley). En la Fig. 3.5 se pueden ver los coeficientes utilizados y en la Fig. 3.6 se puede apreciar un detalle de los coeficientes de KERMA en un rango donde se obtiene una diferencia apreciable.

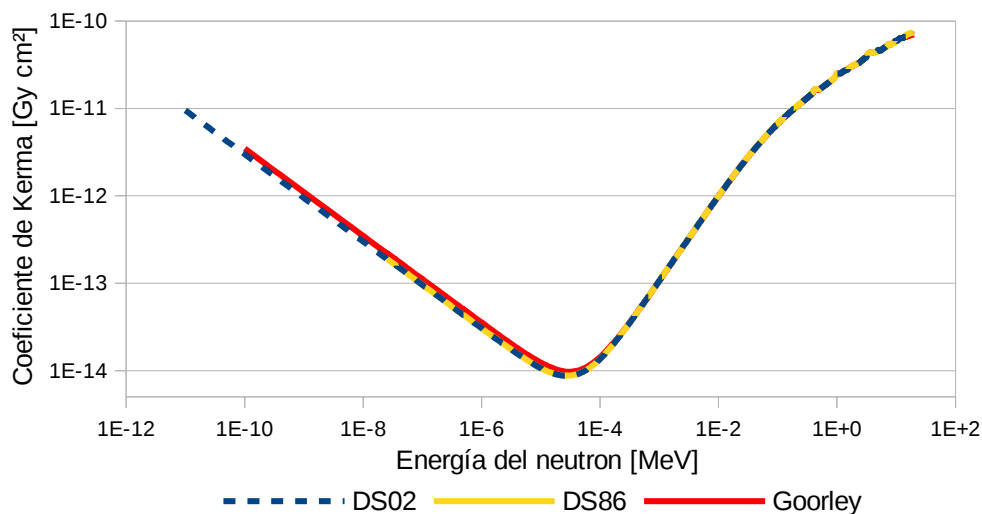


Fig. 3.5 - Coeficientes de KERMA para neutrones

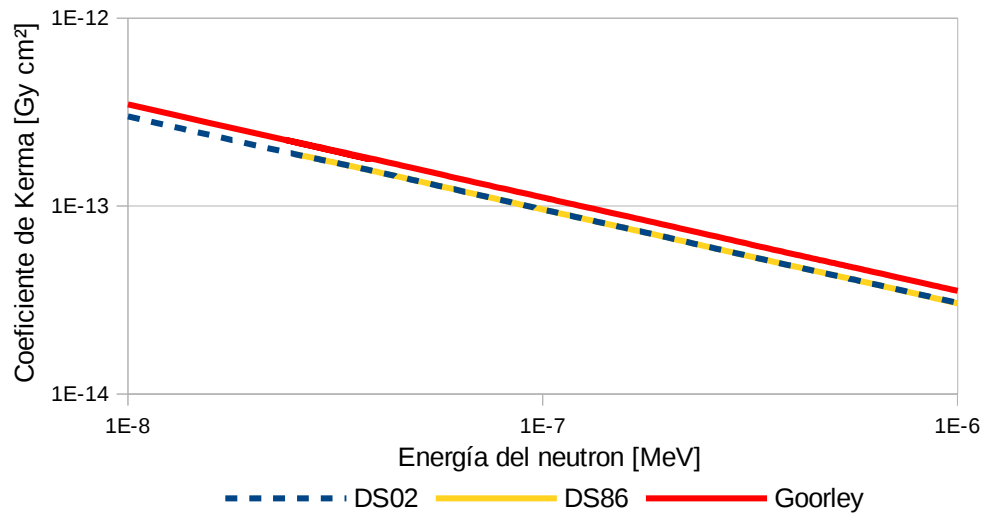


Fig. 3.6 – Detalle del coeficientes de KERMA para neutrones

4. Resultados y discusiones

4.1. Comparación MCNP 5, 6 y X

Se observa en los resultados que, en los casos analizados con el MCNP 5 y 6 los resultados obtenidos son numericamente idénticos para el tally F4:n, no así con el MCNP X. Sin embargo las diferencias entre ambos, 5/6 respecto de X, no son significativas. También se encuentra que los resultados de los tallies para las versiones 6 1.0 y 6 1.1 beta son numericamente idénticas entre sí. En la Fig. 4.1 se muestra únicamente el perfil de flujo térmico normalizado según el tally F4:n de MCNP6 ya que no se aprecian, ni las diferencias gráficas entre los casos, ni los rangos de incertidumbre. El factor de normalización en la Fig. 4.1 es $0,0144552 \text{ cm}^{-2}$.

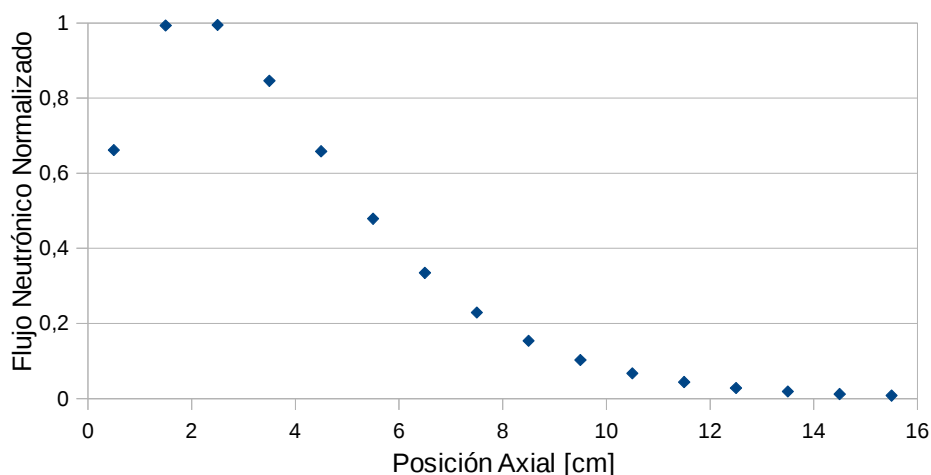


Fig. 4.1 - Perfil de flujo térmico normalizado

Por otro lado, en la Fig. 4.2 se presentan las diferencias relativas, y su error, entre las versiones 5/6 y X. Esto se calcula según la fórmula:

$$\text{Diferencia Relativa porcentual} = \frac{100 \cdot |X_x - X_6|}{X_6},$$

donde X_x y X_6 son las variables a estudiar. En este caso representan el flujo térmico en el detector para el cálculo con MCNP X y MCNP 6 respectivamente.

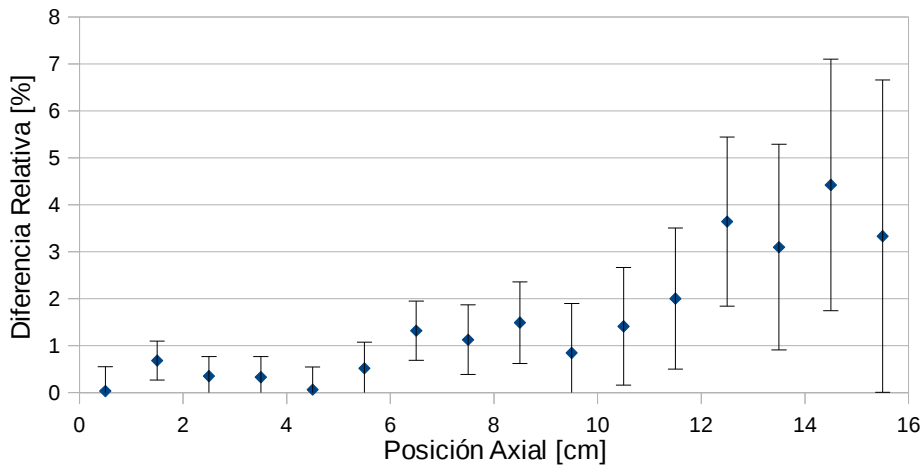


Fig. 4.2 - Diferencias relativas en el perfil de flujo térmico entre versiones 5/6 y X

Luego se realizó la comparación de la energía depositada en los detectores por parte de los fotones [MeV/g] mediante el tally F6:p. Se muestra el perfil normalizado según MCNP 6 en la Fig. 4.3 y las diferencias relativas entre X/5 y 6 se muestran en la Fig. 4.4. En este caso se encuentra que los resultados de las versiones 5 y X son numéricamente iguales entre sí, pero distintos a los obtenidos con MCNP 6. Aún así las diferencias no resultan significativas. El factor de normalización en la Fig. 4.3 es $8,13392 \times 10^{-5}$ MeV/g.

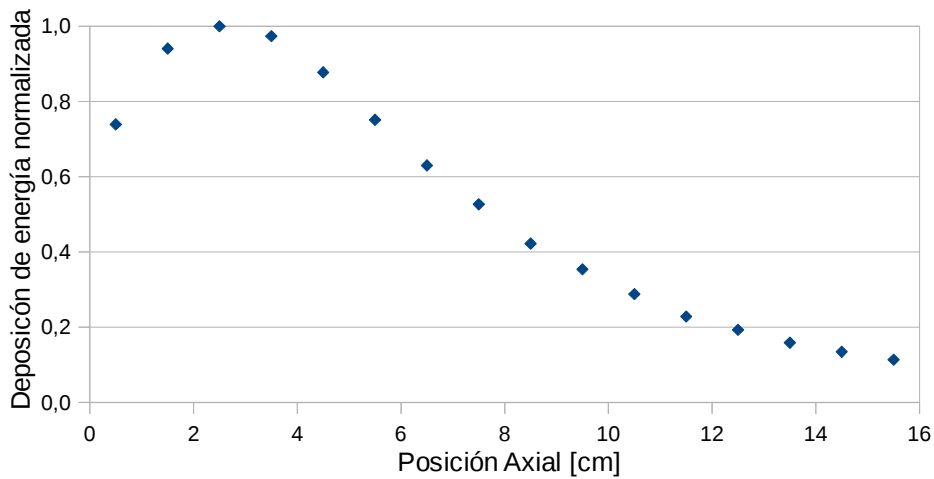


Fig. 4.3 - Perfil normalizado de deposición de energía por fotones

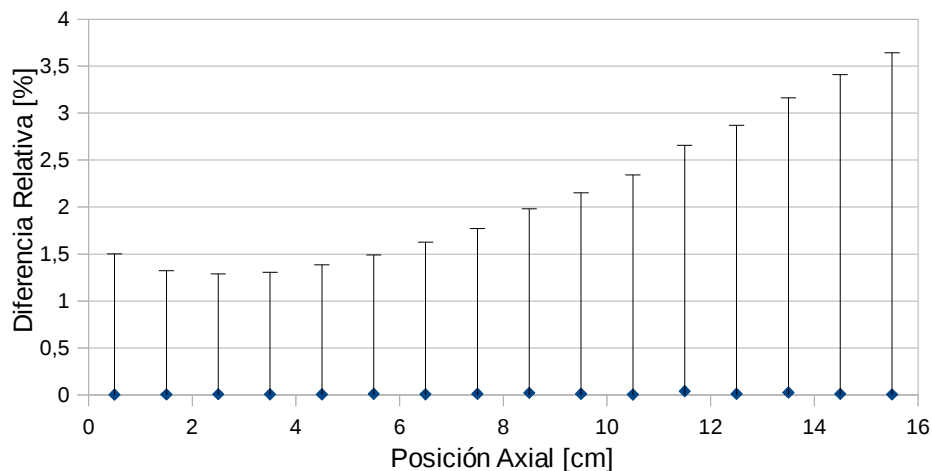


Fig. 4.4 - Diferencias relativas en el perfil de deposición de energía entre versiones 6 y X/5

Se presentan en la Tabla 4.1 los tiempos de cálculo numérico, FOM y error estadístico según la versión de MCNP. Estas últimas variables presentadas son analizadas en el primer detector, punto en el cual el programa realizó las pruebas estadísticas de la simulación.

Versión MCNP	Computer Time (hs)	CTM (hs)	Real TimexNucleos (hs)	E_r [%]	FOM
X 2.7.0	81,64	81,63	81,66	0,26	30,20
5 1.6	70,97	70,96	71,07	0,26	34,74
6 1.0	298,36	298,36	74,76	0,26	33,05
6 1.1 beta	263,63	263,63	67,16	0,26	37,41

Tabla 4.1 - Comparación de tiempos y FOM

Las diferencias expresadas en los tiempos de cálculo y FOM (factor de mérito) muestran un mayor consumo de recursos computacionales para el caso de MCNP X, lo que puede deberse a cambios en las rutinas de cálculo y/o en los tratamientos físicos establecidos por defecto en cada versión.

Durante este análisis se observó una diferencia en el cálculo del 'Computer Time' y del 'CTM' para la versión 6 1.0 y 6 1.1 beta. Se puede observar que, en el caso de las versiones 5 y X el valor de 'Computer Time', 'CTM' y tiempo real multiplicado por la cantidad de núcleos de procesamiento son aproximadamente iguales. Esto no ocurre en el caso de la versión 6 1.0 y 6 1.1 beta, para el cual se debe multiplicar el tiempo real por el cuadrado del número de núcleos para que los tiempos resulten similares.

4.2. Comparación de semillas (MCNP 6)

En las Figuras 5.5 y 5.6 se presentan los gráficos de las diferencias relativas entre los resultados obtenidos al cambiar la semilla en la simulación realizada con MCNP 6.

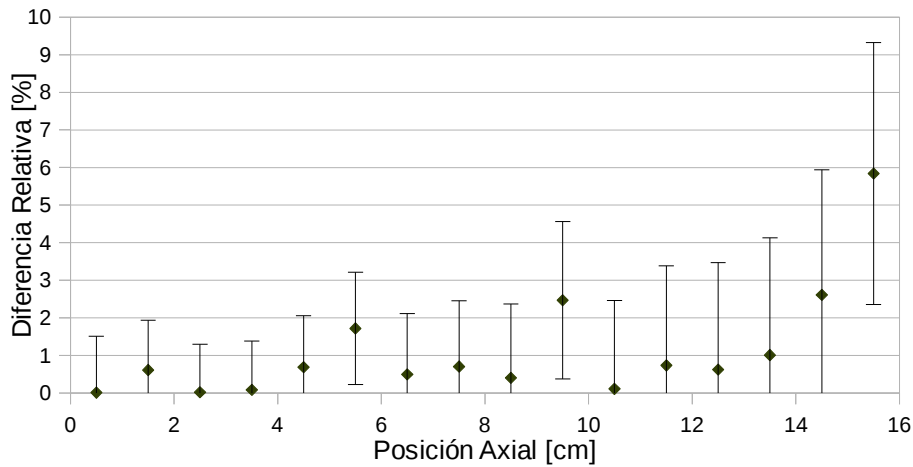


Fig. 4.5 - Diferencias relativas en el perfil de F6:p para diferentes semillas

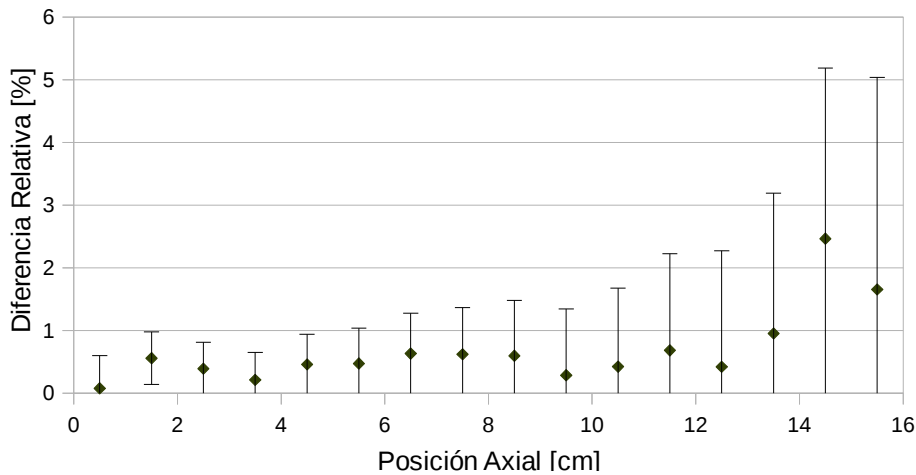


Fig. 4.6 - Diferencias relativas en el perfil de F4:n para diferentes semillas

Se pueden observar en los resultados presentados diferencias entre 0,5-2%, pero prácticamente todos los valores son iguales dentro de los errores estadísticos del cálculo (Fig. 4.5 y Fig. 4.6). Esto permite comprobar que para esta cantidad de partículas, como era de esperar, la rutina presenta resultados con diferencias no significativas según la cadena de números pseudoaleatorios generados.

4.3. Comparación de Tallies (MCNP 6)

De las modelizaciones realizadas se obtuvieron las distribuciones de dosis calculadas mediante los tallies F4 y F6. Se puede apreciar en las Fig. 4.7 y Fig. 4.8 los perfiles normalizados de dosis para fotones y neutrones calculados con diferentes tallies. El factor de normalización en la Fig. 4.7 es $8,13336 \times 10^{-5}$ MeV/g y $1,2945 \times 10^{-14}$ Gy cm² para la Fig. 4.8.

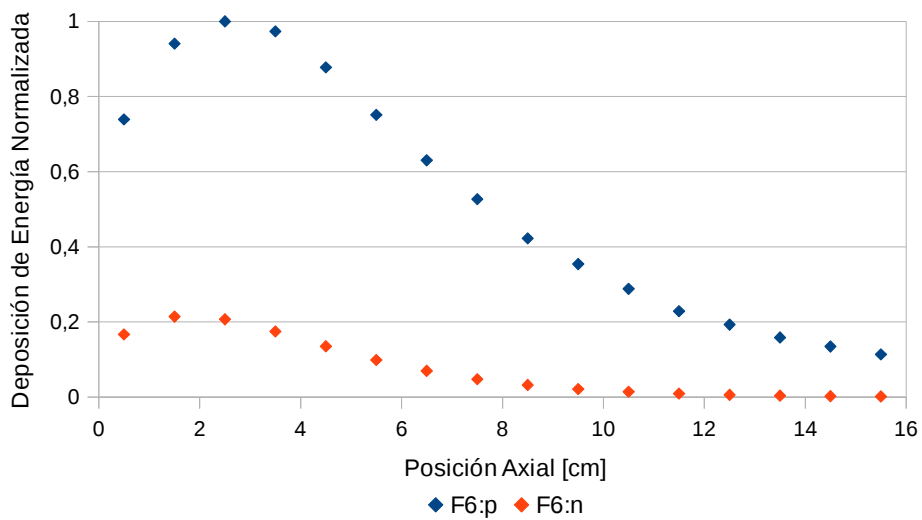


Fig. 4.7 - Perfil normalizado de deposición de energía

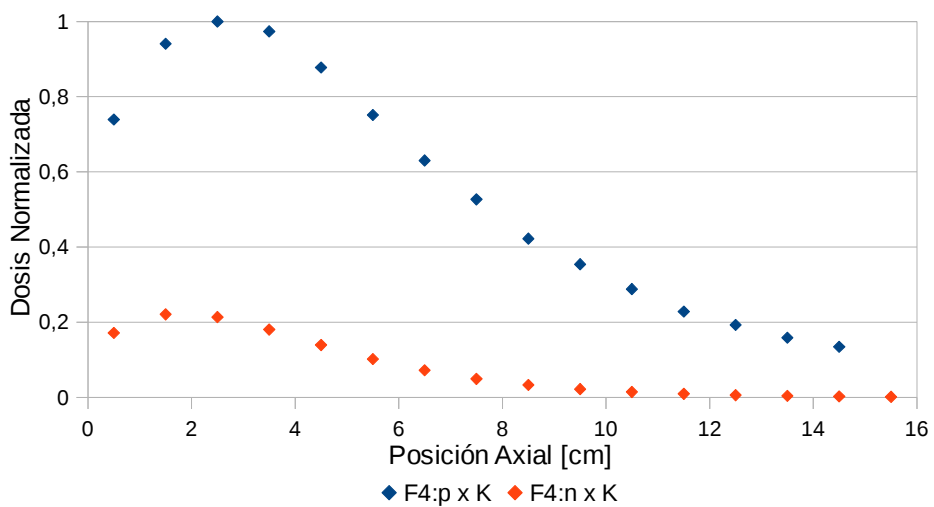


Fig. 4.8 - Perfil normalizado de dosis calculada con el tally F4

En la Fig. 4.9 se observan las diferencias relativas en el cálculo de dosis para neutrones entre distintos tallies, mientras que en la Fig. 4.10 se grafica el caso de los fotones.

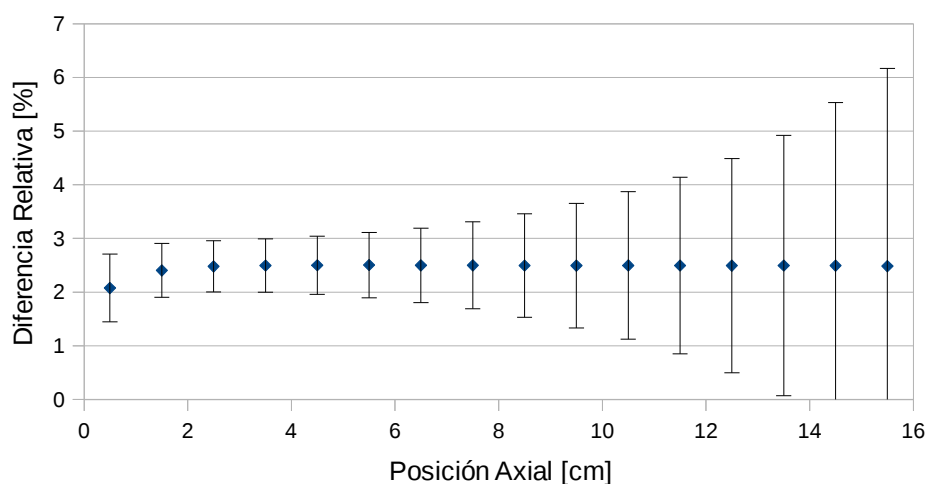


Fig. 4.9 - Diferencias relativas en el perfil de dosis por neutrones

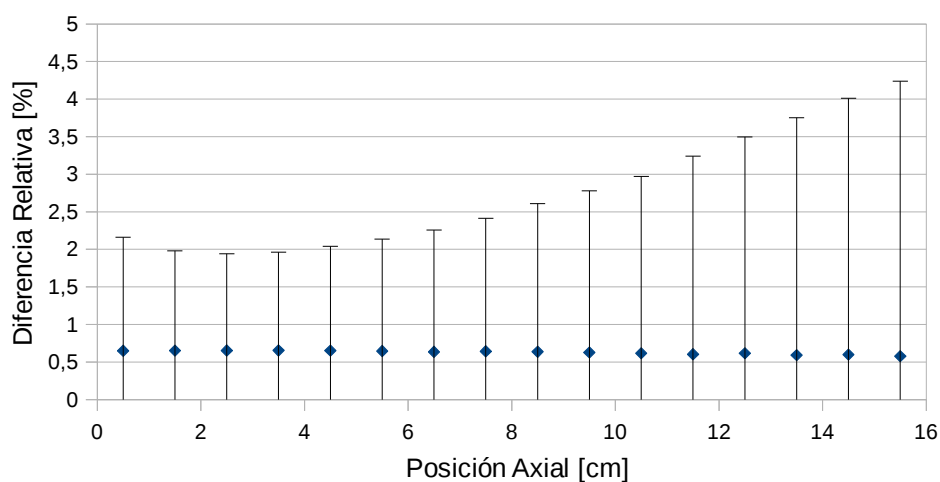


Fig. 4.10 - Diferencias relativas en el perfil de dosis por fotones

Se pueden apreciar diferencias entorno a 0,6% para el caso de los fotones, pero estas caen dentro del rango de incertezas (Fig. 4.10). En cambio, al analizar la dosis por neutrones (Fig. 4.9) los errores no sólo son mayores (2,5%) sino que además, las diferencias resultan significativas. Esto se debió a que en el caso del tally F4 se utilizaron las tablas de los coeficientes de KERMA según distintos autores [26][27], mientras que para el cálculo del tally F6 se utilizaron tablas internas del programa.

4.4. Comparación de composición del fantoma (MCNP 6)

En la comparación del tally F6:n (Fig. 4.11 y Fig. 4.12) se pueden observar diferencias importantes (8-13%) para un mismo fantoma con composición diferente. El factor de normalización en la Fig. 4.11 es $1,61626 \times 10^{-5}$ MeV/g.

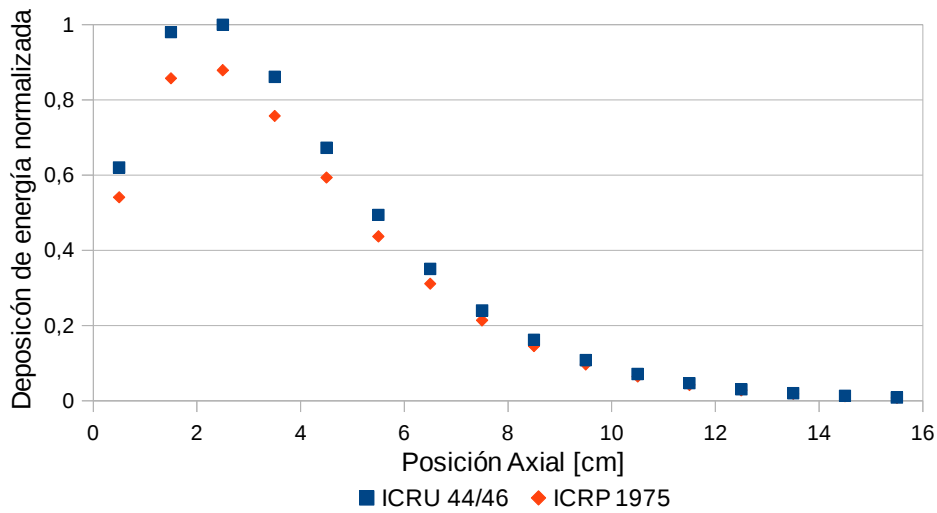


Fig. 4.11 - Perfil normalizado de la deposición de energía por neutrones

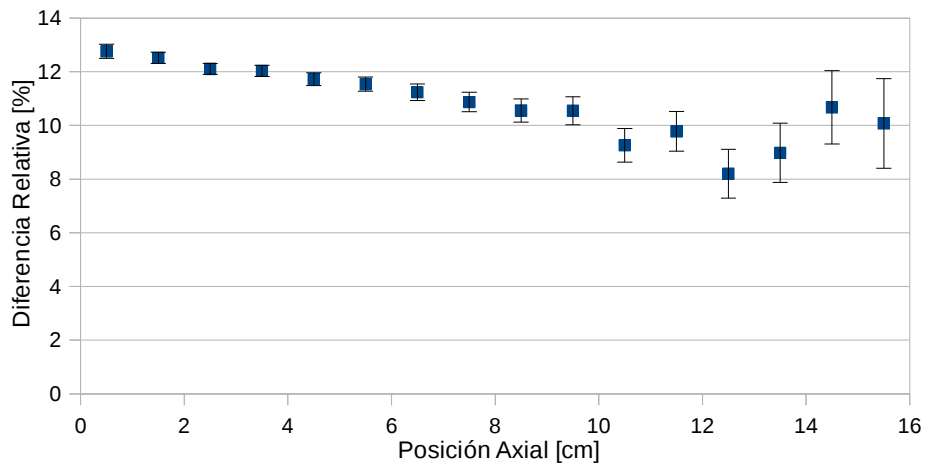


Fig. 4.12 - Diferencias relativas en el perfil de deposición de energía por neutrones

Por otro lado, se calculó el perfil de dosis por neutrones según el flujo. Para esto, se utilizaron distintas bases de datos de coeficientes de KERMA. El caso de Goorley es el caso inicial tratado en 3.3, mientras que DS86 y DS02 [29] corresponden a dos coeficientes de KERMA distintos. En la Fig. 4.13 se contrastan los perfiles, mientras que en la Fig. 4.14 se observan las diferencias relativas respecto del caso de estudio inicial. El factor de normalización en la Fig. 4.13 es $2,86053 \times 10^{-15} \text{ Gy cm}^2$.

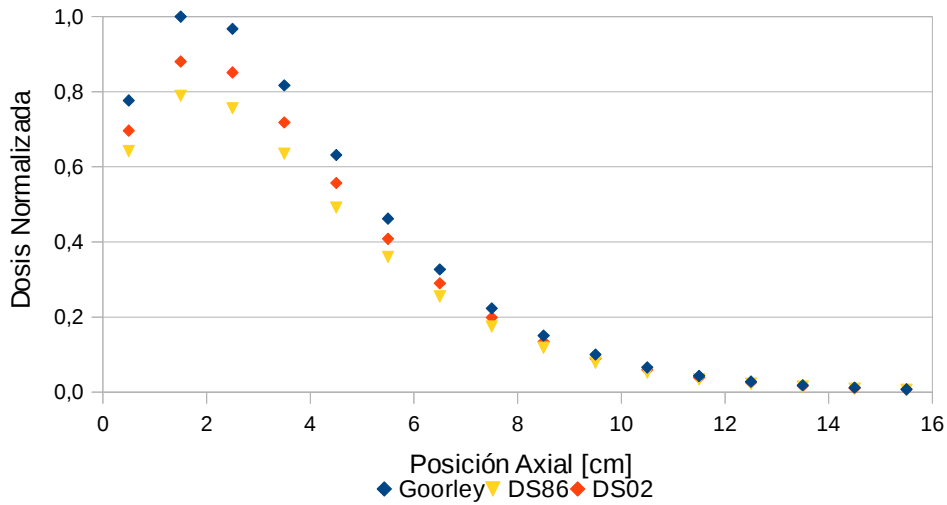


Fig. 4.13 - Perfil normalizado de dosis por neutrones calculado con F4:n

Se pueden apreciar claramente las diferencias que se presentan en el perfil de dosis por neutrones para el nuevo tejido. Cabe reiterar que el fantoma es de tejido blando (al igual que el caso original [24][25]) y lo que se modificó, fue la composición según la caracterización de otro autor [28].

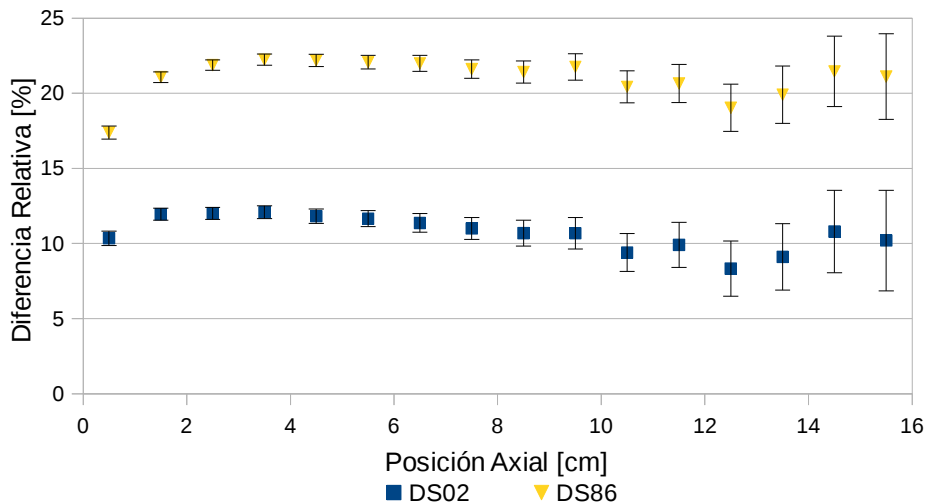


Fig. 4.14 - Diferencias relativas en el perfil de dosis por neutrones calculado con F4:n

Al analizar las diferencias relativas se puede ver que hay una marcada diferencia entre los resultados, tanto para los coeficientes de la biblioteca DS02 (8-12%) como los de DS86 (17-22%) (Fig. 4.14). Esto muestra la relevancia que presentan tanto el tejido como los coeficientes de KERMA y los errores que se pueden incurrir según se adopten trabajos de diferentes autores.

5. Conclusiones

Al comparar las diferentes versiones de MCNP, se concluyó que las diferencias en los resultados obtenidos no eran significativas. Al estudiar los tiempos empleados para las simulaciones, se observó que la versión más eficiente era la MCNP6 1.1 beta requiriendo aproximadamente 2 horas menos que la versión de MCNP6 1.0.

Cuando se corrieron los casos con diferentes semillas, las diferencias en los resultados no fueron significativas, es decir, el cambio de semilla generadora de números aleatorios no afectó los resultados.

Para los casos en los que se calcularon los perfiles de dosis mediante los tallies F4 con coeficientes de KERMA y F6, se observaron diferencias significativas en las dosis de neutrones, pero no en el caso de los fotones. Esto se debió a las diferencias entre las tablas de coeficientes de KERMA empleadas para multiplicar el tally F4 y las tablas utilizadas por MCNP para calcular el tally F6.

Cuando se compararon los resultados del tally F6 de neutrones para un mismo fantoma pero con composiciones levemente diferentes se observaron diferencias importantes (8-13%). Finalmente, se observó que para coeficientes de KERMA extraídos de diferentes bases de datos, las diferencias en las dosis por neutrones llegaban a valores del 20 %.

Estos resultados demostraron la importancia que tiene la correcta caracterización y modelización, no sólo del fantoma a irradiar, sino también de las bibliotecas de datos nucleares y de las herramientas de cálculo aplicadas para realizar la dosimetría numérica en BNCT.

Cabe destacar que las conclusiones extraídas de este trabajo se podrían extrapolar conceptualmente, no numéricamente, a otras aplicaciones del código MCNP. Por este motivo, para todas las actividades en que se lo utilice, se debe realizar el correcto estudio y modelado del sistema.

Se puede tomar este trabajo como punto de partida para siguientes investigaciones en el tema, comparando y analizando diferencias bajo otras formas de cálculo de dosis y en otros fantomas de interés.

6. Referencias bibliográficas

- [1] Barth, R. J., "A critical assessment of boron neutron capture therapy: an overview". Department of Pathology, The Ohio State University, Columbus, OH, USA , Journal of Neuro-Oncology 62: 1–5, 2003.
- [2] Barth, R. J., Soloway, A.H., and Ralph G. Fairchild, "Boron Neutron Capture Therapy of Cancer". The Ohio State University, Columbus, OH, USA, CANCER RESEARCH 50. 1061-1070. February 15, 1990
- [3] Sauerwein, W. A. G., Moss, R. L., Requirements for Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) at a Nuclear Research Reactor, European Commission, Joint Research Center, Institute for Energy, 2009
- [4] Rogus et al., Mixed field dosimetry of neutron beams for Boron Neutron Capture Therapy at the Massachusetts Institute of Technology; Cancer Neutron Capture Therapy, Pp. 457-466, Edited by Mishima, Plenum Press, 1996.
- [5] Taylor, H. J., Goldhaber, M., Detection of nuclear disintegration in a photographic emulsion, Nature 135:341, 1935
- [6] Locher, G.L., Biological effects and therapeutic possibilities of neutrons, Am. J. Roentgenol. Radium Ther, 1936, 36: 1-13
- [7] Slatkin, D. N., A History of Boron Neutron Capture Therapy of Brain Tumours, Brain, Vol. 114, No. 4, pp1609-1629, 1991
- [8] Hatanaka, H. et al, Clinical experience of boron-neutron capture therapy for gliomas – a comparison with conventional chemo-immuno-radiotherapy, in Boron-Neutron Capture Therapy for Tumours, Ed. H.Hatanaka, Niigata, Japan: Nishimura, 1986
- [9] Mishima, Y., Ichihashi, M., Hatta, S., Honda, C., Yamamura, K., Nakagawa, T., New thermal neutron capture therapy for malignant melanoma: melanogenesis-seeking ^{10}B molecule - melanoma cell interaction from in vitro to first clinical trial, Pigment Cell. Res. 2 (1989), pp. 226–234
- [10] González, S., J., et al, First BNCT treatment of a skin melanoma in Argentina: dosimetric analysis and clinical outcome, Appl Radiat Isot, Nov, 61(5):1101-5, 2004.
- [11] Sporleder, F., Extension de la dosimetría del haz clínico de la facilidad de BNCT del reactor RA-6, Instituto Balseiro, CNEA, 2005.
- [12] Aramburu, X. O. , Bisbal, J. J., Radiaciones Ionizantes: Utilizacion y riesgos, Institut de Techniques Energetiques INTE, Ediciones UPC, Barcelona, 1996.
- [13] Lamarsh, J. R., Baratta, A. J., Introduction to Nuclear Engineering, Third Edition, Prentice Hall, 2001.
- [14] Duderstadt, J. J., Hamilton, L. J., Nuclear Reactors Analysis, Wiley, 1976
- [15] Ott, K. O., Bezella, W. A., *Introductory Nuclear Reactor Statics*, American Nuclear Society, 1983
- [16] Bielajew, A. F., Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport, University of Michigan, Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, 2000.

- [17] Leszczynski, F., Curso de entrenamiento en el manejo del programa MCNP, Centro Atómico Bariloche, 2003.
- [18] Pelowitz, D. B., MCNPX User's Manual, Versión 2.7.0 (LA-CP-11-00438), Los Alamos National Laboratory, 2011.
- [19] X-5 Monte Carlo Team, "MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code", Version 5 (LA-UR-03-1987), Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [20] Pelowitz, D. B., MCNP6 User's Manual, Versión 1.0 (LA-CP-13-00634, Rev. 0), Los Alamos National Laboratory, 2013.
- [21] Pelowitz, D. B., Fallgren, A. J., McMath, G. E., MCNP6 User's Manual, Version 1.1 beta (LA-CP-14-00745, Rev. 0), Los Alamos National Laboratory, 2014.
- [22] Oña Rodríguez, W. V., Estudio de los procesos de retrodispersión en un detector irradiado dentro de un material arbitrario con radiación gamma y su papel en la determinación de la dosis absorbida, Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ecuador, 2006.
- [23] Sheino, I., Khokhlov, V., Kulakov, V., Zaitsev, K., Estimation of neutron KERMA in biological tissue containing boron and gadolinium compounds for neutron capture therapy, 2004
- [24] ICRU 44, Tissue substitutes in radiation dosimetry and measurement, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1989.
- [25] ICRU 46, Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1992.
- [26] Hubbell, J. H., Seltzer, S. M., Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest, NISTIR 5632, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (May 1995 – Last Update: July 2004).
- [27] Goorley, J. T., Kiger III, W. S., Zamenhof, R. G., "Reference Dosimetry Calculations for Neutron Capture Therapy with Comparison of Analytical and Voxel Models", Nuclear Reactor Laboratory, Massachusetts Institute of Technology, Medical Physics, Vol. 29, No 2, pp. 145-156 (2002)
- [28] ICRP Publication 23, "Report on the Task Group on Reference Man", International Commission on Radiological Protection, Pergamon, 1975.
- [29] Kerr, G. D., Survivor dosimetry – Part A Fluence to KERMA conversion coefficients, Reassessment of the atomic bomb radiation dosimetry for Hiroshima and Nagasaki, Dosimetry system 2002, Volume 2, Oak Ridge National Lab, 2002.

7. Anexo – Archivo de entrada de MCNP

c Celda de Fantoma tejido blando

```
1 1 -1.03 -1 #10 #11 #12 #13 #14 #15 #16 #17 #18 #19
    #20 #21 #22 #23 #24 #25
    #30 #31 #32 #33 #34 #35 #36 #37 #38 #39
    #40 #41 #43 #44 #45 #46 #47 #48 #49
    #50 #51 #52 #53 #54 #55
    imp:n,p=1
```

c

```
2 0 1 -2 -3 imp:n,p=1
```

```
3 0 1 -2 3 imp:n,p=1
```

c

c Detectores

```
10 1 -1.03 -10 imp:n,p=1
```

```
11 1 -1.03 -11 imp:n,p=1
```

```
12 1 -1.03 -12 imp:n,p=1
```

```
13 1 -1.03 -13 imp:n,p=1
```

```
14 1 -1.03 -14 imp:n,p=1
```

```
15 1 -1.03 -15 imp:n,p=1
```

```
16 1 -1.03 -16 imp:n,p=1
```

```
17 1 -1.03 -17 imp:n,p=1
```

```
18 1 -1.03 -18 imp:n,p=1
```

```
19 1 -1.03 -19 imp:n,p=1
```

c

```
20 1 -1.03 -20 imp:n,p=1
```

```
21 1 -1.03 -21 imp:n,p=1
```

```
22 1 -1.03 -22 imp:n,p=1
```

```
23 1 -1.03 -23 imp:n,p=1
```

```
24 1 -1.03 -24 imp:n,p=1
```

```
25 1 -1.03 -25 imp:n,p=1
```

c

```
30 1 -1.03 30 -31 60 -61 imp:n,p=1
```

```
31 1 -1.03 30 -31 62 -63 imp:n,p=1
```

```
32 1 -1.03 30 -31 64 -65 imp:n,p=1
```

```
33 1 -1.03 30 -31 66 -67 imp:n,p=1
```

```
34 1 -1.03 30 -31 68 -69 imp:n,p=1
```

```
35 1 -1.03 30 -31 70 -71 imp:n,p=1
```

```
36 1 -1.03 30 -31 72 -73 imp:n,p=1
```

```
37 1 -1.03 30 -31 74 -75 imp:n,p=1
```

```
38 1 -1.03 30 -31 76 -77 imp:n,p=1
```

```
39 1 -1.03 30 -31 78 -79 imp:n,p=1
```

c

```
40 1 -1.03 26 -27 74 -75 imp:n,p=1
```

```
41 1 -1.03 28 -29 74 -75 imp:n,p=1
```

C 42 = 37

```
43 1 -1.03 32 -33 74 -75 imp:n,p=1
```

```
44 1 -1.03 34 -35 74 -75 imp:n,p=1
```

```
45 1 -1.03 36 -37 74 -75 imp:n,p=1
```

```
46 1 -1.03 38 -39 74 -75 imp:n,p=1
```

```
47 1 -1.03 40 -41 74 -75 imp:n,p=1
```

```
48 1 -1.03 42 -43 74 -75 imp:n,p=1
```

```
49 1 -1.03 44 -45 74 -75 imp:n,p=1
```

```
50 1 -1.03 46 -47 74 -75 imp:n,p=1
```

```
51 1 -1.03 48 -49 74 -75 imp:n,p=1
```

```
52 1 -1.03 50 -51 74 -75 imp:n,p=1
```

53 1 -1.03 52 -53 74 -75 imp:n,p=1
54 1 -1.03 54 -55 74 -75 imp:n,p=1
55 1 -1.03 56 -57 74 -75 imp:n,p=1

c

c Outside

999 0 2 imp:n,p=0

c

c SURFACE CARDS

c

c Fantoma

1 rpp 0 60 0 60 0 60

c

10 s 0.5 30 30 0.25
11 s 1.5 30 30 0.25
12 s 2.5 30 30 0.25
13 s 3.5 30 30 0.25
14 s 4.5 30 30 0.25
15 s 5.5 30 30 0.25
16 s 6.5 30 30 0.25
17 s 7.5 30 30 0.25
18 s 8.5 30 30 0.25
19 s 9.5 30 30 0.25
20 s 10.5 30 30 0.25
21 s 11.5 30 30 0.25
22 s 12.5 30 30 0.25
23 s 13.5 30 30 0.25
24 s 14.5 30 30 0.25
25 s 15.5 30 30 0.25

c

26 px 0.25
27 px 0.75
28 px 1.25
29 px 1.75
30 px 2.25
31 px 2.75
32 px 3.25
33 px 3.75
34 px 4.25
35 px 4.75
36 px 5.25
37 px 5.75
38 px 6.25
39 px 6.75
40 px 7.25
41 px 7.75
42 px 8.25
43 px 8.75
44 px 9.25
45 px 9.75
46 px 10.25
47 px 10.75
48 px 11.25
49 px 11.75
50 px 12.25
51 px 12.75
52 px 13.25
53 px 13.75

```

54 px 14.25
55 px 14.75
56 px 15.25
57 px 15.75
c
60 C/X 30 30 0.75
61 C/X 30 30 1.25
62 C/X 30 30 1.75
63 C/X 30 30 2.25
64 C/X 30 30 2.75
65 C/X 30 30 3.25
66 C/X 30 30 3.75
67 C/X 30 30 4.25
68 C/X 30 30 4.75
69 C/X 30 30 5.25
70 C/X 30 30 5.75
71 C/X 30 30 6.25
72 C/X 30 30 6.75
73 C/X 30 30 7.25
74 C/X 30 30 7.75
75 C/X 30 30 8.25
76 C/X 30 30 8.75
77 C/X 30 30 9.25
78 C/X 30 30 9.75
79 C/X 30 30 10.25
c
c Outside box
2 rpp -1 61 -1 61 -1 61
c
c Source surface
3 px -0.1
c DATA MATERIAL - Tejido Blando
c H,O,C,N,Na,P,S,Cl,K
c
m1 01001 -0.105
    08016 -0.602
    06012 -0.256
    07014 -0.027
    11023 -0.001
    15031 -0.002
    16032 -0.003
    17000 -0.002
    19000 -0.002
c
C TRATAMIENTO TERMICO S(a,b)
mt1 lwtr.01t
mode n p
phys:p 1e1 1
c
c MIT SOURCE /
sdef erg=d5 pos=-0.1 30 30 sur=3 rad=d4 dir=d1
c
si1 H 0.400
    0.425
    0.450
    0.475
    0.500

```

0.525
0.550
0.575
0.600
0.625
0.650
0.675
0.700
0.725
0.750
0.775
0.800
0.825
0.850
0.875
0.900
0.925
0.950
0.975
1.000

c
sp1 0.0000E+00

2.0408E-04
8.1633E-04
1.8367E-03
3.2653E-03
5.1020E-03
7.3469E-03
1.0000E-02
1.3061E-02
1.6531E-02
2.0408E-02
2.4694E-02
2.9388E-02
3.4490E-02
4.0000E-02
4.5918E-02
5.2245E-02
5.8980E-02
6.6122E-02
7.3673E-02
8.1633E-02
9.0000E-02
9.8776E-02
1.0796E-01
1.1755E-01

c
si4 8
C Epithermal Source
si5 H 0.00E-00 4e-07 45ilog 1e-2
sp5 0.0000E-00 2.1277e-02 46r
c END SOURCE /
c
c TALLY
c Center Profile Water
c
F4:n 10 14i 25 30 10i 41 43 11i 55

E4 4e-7 1e-2 20 T
FQ4 F E
c
F6:p 10 14i 25 30 10i 41 43 11i 55
FQ6 F E
c
prdmp 2J 1 1 J
print
c
nps 1e8
c