

GENERACIÓN DE ESPECTROS SINTÉTICOS GAMMA POR MATLAB

**Carrera de Especialización en Radioquímica
Instituto Dan Beninson, CNEA-UNSAM**

Julián Javier Palmerio
jpalmerio@cae.cnea.gov.ar

Director: Aníbal Damián Coppo



UNSAM
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE
SAN MARTÍN

INDICE GENERAL

I. INTRODUCCIÓN.....	2
II. MARCO TEÓRICO.	3
III. PLANTEO DEL PROBLEMA.	9
IV. PARTE EXPERIMENTAL.....	10
V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	15
VI. CONCLUSIONES.	25
Bibliografía.....	26
Agradecimientos.....	26

I. INTRODUCCIÓN.

Este trabajo surge como una respuesta a la necesidad de explorar una gran cantidad de curvas de eficiencia en diferentes geometrías y con fuentes inhomogéneas de amplia diversidad de matrices. Esta necesidad está asociada a otra que es la de verificar y caracterizar a los residuos radiactivos que el generador entrega al Programa Nacional de Gestión de Residuos Radiactivos. En este ámbito, los radionucleídos más trascendentes son ^{60}Co y ^{137}Cs .

El costo de construir y medir todas las fuentes patrón es enorme, tanto en dinero como en horas hombre. Por eso se eligió el camino de la simulación. La mayor dificultad es la de conseguir que el modelo que se construye debe estar lo más ajustado posible a la realidad de la medición. La consecuencia inmediata de esto es que se debe tener el control sobre la mayor cantidad de aspectos (sino todos) de la representación de la medición.

Teniendo en cuenta lo anterior se decidió modelar de cero la física de las interacciones de los fotones gamma con la materia. Ese es el aspecto sobre el que trata este trabajo, es una porción de la solución a un problema. Básicamente queda pendiente el modelado de la cadena electrónica de medición (aspecto en el que se está trabajando actualmente).

La simulación en general tiene la utilidad de ser una herramienta de predicción. En el campo de la espectrometría gamma no nos va permitir predecir las energías de los radionucleídos que no estén descubiertas. Lo que si nos va a permitir es que en base al conocimiento actual de las interacciones de los fotones gamma con la materia y las emisiones de los radionucleídos vamos a poder predecir un espectro gamma. O sea, si todo es como creemos, podremos obtener algo similar a lo que se obtendría con una medición real. Este es el sentido de predicción en una simulación. Esto es aplicable a cualquier tipo de diseño que involucre el transporte de fotones gamma. Este tipo de predicción nos permitiría tener de antemano alguna información de buena calidad sobre el comportamiento de un diseño. Incluso se podría evaluar el impacto de alguna modificación en una instalación que ya esté operando.

El programa desarrollado para realizar las simulaciones resuelve el transporte de fotones para varias fuentes y varios detectores, teniendo en cuenta las interacciones con los materiales que hay en el recinto simulado. Es una simulación en la que se analizan todas las trayectorias de todos los fotones emitidos por la fuente durante un cierto tiempo.

La decisión de modelar mediante el uso de MATLAB se vio fundamentada principalmente en la flexibilidad y transparencia que se obtienen al programar los diversos aspectos de la interacción de fotones gamma con la materia. El generador de números aleatorios es una parte fundamental en la aplicación de los métodos de Monte Carlo. Estos métodos usan una enorme cantidad de sorteos en su ejecución, por lo que es necesario que el generador de números aleatorios tenga asegurada una longitud de período lo más larga posible.

Para explorar la corrección física del modelo desarrollado se diseñaron dos geometrías distintas. Una es un modelado muy simple de una medición típica de un tambor de líquidos radiactivos cementados. La otra es una representación de una medición más cercana a lo que se propone idealmente (fuente puntual).

II. MARCO TEÓRICO.

II.1 Espectros Gamma.

Los espectros gamma colectan la información sobre la cantidad de eventos y la energía de cada uno. La energía de cada evento está asociada a la energía de los fotones gamma que es consecuencia de las interacciones los mismos sufren con la materia. Las interacciones son efecto fotoeléctrico, dispersión Compton y producción de pares.

El efecto fotoeléctrico es la absorción total de la energía de un fotón en un electrón de un átomo que como consecuencia es liberado del mismo. Para que ocurra esta situación la energía del fotón debe ser mayor que la energía de unión del electrón al átomo.

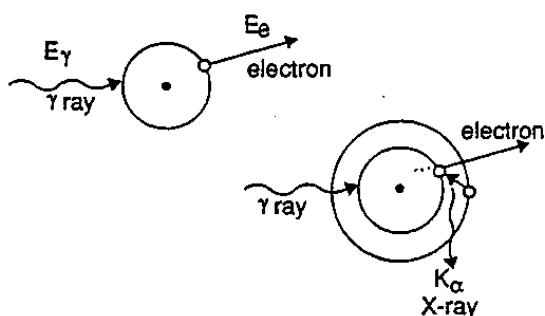


Fig. 1. Efecto fotoeléctrico y la posible posterior emisión de rayos X.

La dispersión Compton ocurre como consecuencia de la absorción parcial de la energía del fotón en un electrón de un átomo. La energía del fotón debe ser suficiente para liberar al electrón del átomo y además debe sobrar. Esto es necesario ya que en una dispersión Compton la energía que sobra es transportada por un nuevo fotón creado como consecuencia de la interacción. La dirección del nuevo fotón puede ser evaluada a partir de la distribución de Klein-Nishina. Esta distribución nos permite evaluar la distribución de probabilidades angulares en función de la energía del fotón incidente.

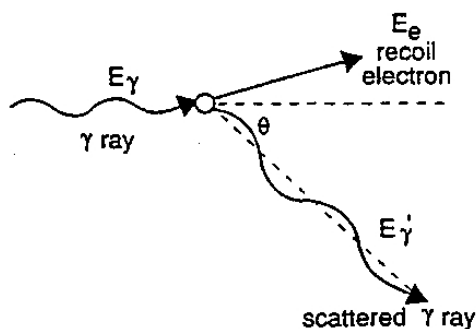


Fig. 2. Dispersión Compton.

La producción de pares es una interacción que considera el átomo como un todo. Este proceso tiene lugar dentro del campo coulombiano del núcleo. La interacción da como resultado la formación de un par electrón-positrón. Por esta razón el fotón gamma debe tener al menos la energía suficiente para crear la masa de este par en reposo. El

positrón se aniquila con un electrón del medio muy rápidamente luego de su creación (para que esto ocurra el positrón debe estar prácticamente en reposo). Esta aniquilación genera dos fotones gamma de 511 keV cuyas energías corresponden a la masa en reposo de las partículas aniquiladas. Estos fotones remueven en la misma dirección y sentidos opuestos.

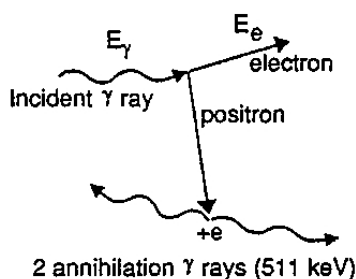


Fig. 3. Creación de pares y la posterior aniquilación del positrón.

Estos efectos permiten interpretar el espectro gamma obtenido con un detector. Los detectores registran la energía de los eventos que en él ocurren. Se puede teorizar sobre dos casos extremos, el detector muy pequeño y el detector infinitamente grande. A partir de estos se puede definir el detector real.

El detector muy pequeño se puede considerar como un detector en el que solo puede ocurrir una interacción. Teniendo eso en cuenta y considerando que solo llegan al detector fotones de una determinada energía, se espera que:

- El pico de energía plena esté formado solo por eventos de absorción fotoeléctrica.
- Si la energía de los fotones permite la creación de pares, al ocurrir esta en el detector y la posterior aniquilación del positrón, ambos fotones gamma de 511 keV escapen del detector. De esta forma aparece solo el pico correspondiente al doble escape.
- La distribución Compton logre manifestarse.

El detector infinitamente grande se puede considerar como un detector en el que ocurren las interacciones necesarias para que el fotón que en el ingresa deposite toda su energía. Teniendo eso en cuenta y considerando que solo llegan al detector fotones de una determinada energía, se espera que:

- El pico de energía plena esté formado por eventos de todas las formas de interacción. Este es el único pico del espectro.
- No se observen los picos de escape simple o doble, tampoco es posible que se observe ninguna distribución Compton formada dentro del detector.

Se considera como detector real al que permite algunas interacciones del fotón gamma con el material del detector. Esta característica hace que se puedan ver una diversidad de picos en los espectros recogidos con un detector real. Considerando que solo llegan al detector fotones de una determinada energía, se espera que:

- Este presente un pico correspondiente a la energía plena de los fotones. Este pico se forma con las contribuciones de todos los efectos.
- Si la energía de los fotones permite la creación de pares, al ocurrir esta en el detector y la posterior aniquilación del positrón, los fotones gamma de 511 keV puedan escapar uno, ambos o ser absorbidos en el detector. Esto daría lugar a la formación de los picos de escape simple y doble.
- La distribución Compton logre manifestarse.

A continuación se muestran algunos espectros ideales para los detectores definidos anteriormente. Hay que tener en cuenta que las consideraciones anteriores valen solo si en el universo solo hay una fuente puntual monoenergética y un detector. Si se consideran otros objetos como blindajes o el material constituyente de una fuente real, aparecería un pico de 511 keV debido a la creación de pares y la aniquilación del positrón en algún material que no sea el detector. Además se verían energías correspondientes a fotones dispersados por Compton en los materiales circundantes.

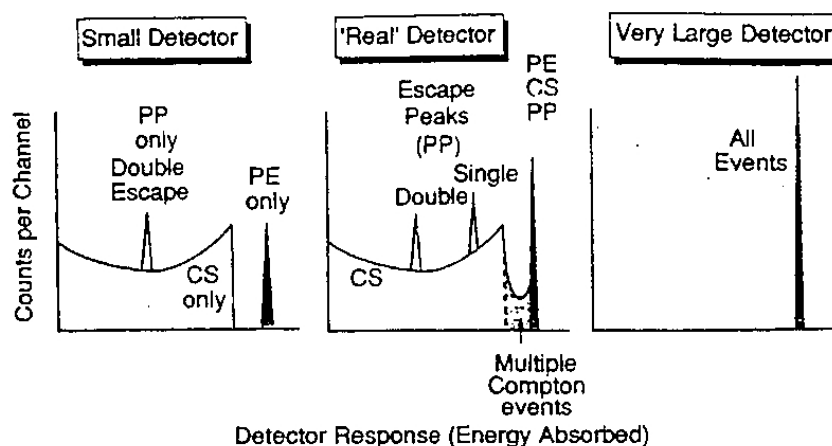


Fig. 4. Detectores ideales.

II.2 Métodos de Monte Carlo.

Los métodos de Monte Carlo nos dan la posibilidad de obtener soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas mediante el uso de experimentos de muestreo estadístico en una computadora.

Es aplicable tanto a problemas que contienen estructuras estadísticas como a los que son netamente determinísticos. En esto no es diferente de otros métodos de aproximación. Sin embargo, la verdadera ventaja es que por Monte Carlo el error absoluto decrece con $n^{-1/2}$, mientras que con otros métodos decrece con $n^{-1/m}$ (donde n es el número de experimentos y m es el tamaño del problema). El error de la solución obtenida se puede considerar una variable del método, porque uno propone cuanto quiere acercarse a la solución. Por supuesto, el error nulo no es alcanzable, cuanto más se achica el error, más tiempo de cálculo es necesario.

En el campo de la física este método es reconocido como el único que actualmente aporta soluciones a muchos problemas de transporte (en particular al transporte por neutrones) y problemas de estructura por grilla.

Otra característica del método es que una vez aproximada la solución con su error absoluto, es posible modificar el planteo del problema y lograr la misma solución pero con un costo computacional menor. Esto es la base de las "técnicas de reducción de

varianza”. Sería más correcto llamarlas “técnicas de mejoramiento de eficiencia” ya que no actúan sobre la varianza estadística, sino sobre la eficiencia del cálculo.

El uso de este método está ligado al tiempo de cálculo computacional. Como las computadoras continuamente evolucionan, es esperable que este método se vuelva de uso corriente.

Finalmente podemos decir que en los métodos de Monte Carlo lo que se hace es explorar una porción del problema en forma aleatoria y obtener en base a eso una solución aproximada. Cuanto más se explore el problema, más precisa será la solución obtenida.

II.3 El generador de números aleatorios.

El generador de números aleatorios es una parte fundamental en la aplicación de los métodos de Monte Carlo. Estos métodos usan una enorme cantidad de sorteos en su ejecución, por lo que es necesario que el generador de números aleatorios tenga asegurada una longitud de período lo más larga posible.

Imaginemos que el generador nos va dando un número aleatorio comprendido entre 0 y 1, si formamos una sucesión con todos esos valores no vamos a ver repetido ninguno siempre que no excedamos el tamaño de la sucesión mas allá de la longitud de período. O sea, la longitud de período nos dice cuantos números sin repetirse ninguno podremos obtener con el generador.

Lo que en realidad hace un generador de números aleatorios es proveernos de una cantidad de números que guardan muchas similitudes con un conjunto de números obtenidos por verdaderos sorteos. Finalmente se trabaja con un conjunto de números determinados por el generador; esto más que aleatorio es determinista.

El generador elegido en el programa escrito en MATLAB es el “Mersenne Twister” de Makoto Matsumoto y Takuji Nishimura el cual posee una longitud de período de $2^{19937}-1$ (MCNP opera con un generador congruencial multiplicativo, de longitud de período de $2^{31}-2$), además es muy rápido ya que solo usa sumas y restas. La velocidad es muy importante ya que prácticamente el peso de cálculo del programa está ligado a los sorteos que todo el tiempo se realizan.

Todavía no se dispone de una batería de pruebas totalmente conclusivas y globalmente aceptadas sobre la calidad de un generador, pero sí se puede decir que el generador elegido para llevar a cabo las simulaciones realizadas mediante MATLAB pasó todas las pruebas que existen al respecto hasta ahora.

II.4 Diseño del Programa.

El programa se escribió en el lenguaje MATLAB. Este es básicamente una simulación por Monte Carlo. Resuelve el transporte de fotones para varias fuentes y varios detectores, teniendo en cuenta las interacciones con los materiales que hay en el recinto simulado.

El programa desarrollado analiza la trayectoria de cada fotón en forma discreta. Se evalúa la ocurrencia de una interacción con la materia cada un *camino libre medio* (se supone un solo efecto por interacción). Las interacciones evaluadas son *efecto fotoeléctrico*, *dispersión Compton* y *producción de pares*. Además de las interacciones anteriores se considera la posibilidad de no interacción del fotón con la materia, esta se calcula a partir de la atenuación de un haz de fotones gamma que atraviesan un espesor equivalente a un *camino libre medio*. La ecuación 1 representa la atenuación que sufre un haz de fotones al atravesar un espesor x en un material de coeficiente de absorción μ .

La ecuación 2 se deduce de la ecuación 1 para la situación en la que un haz de fotones atraviesa un espesor de material $1/u$. El valor $1/u$ es el *camino libre medio*, o sea es la distancia media que recorre un fotón entre interacciones.

$$I = I_0 \cdot e^{-u \cdot x}$$

Ec 1. Ley de atenuación de un haz de fotones. Donde u es el coeficiente de absorción y x es el espesor que el haz atraviesa.

$$P_{ni} = \frac{I}{I_0} = e^{-u \cdot \frac{1}{u}} = e^{-1}$$

Ec 2. Probabilidad de no interacción con la materia al atravesar un espesor de $1/u$.

Ahora que la probabilidad de no interacción es conocida y además está normalizada, es posible describir la probabilidad de interacción para cada uno de los posibles efectos.

$$P_i = 1 - P_{ni} = 1 - e^{-1}$$

Ec 3. Probabilidad de interacción del fotón con la materia por algún efecto.

$$P_{fe} = \frac{\Sigma_{fe}}{u} \cdot P_i; P_{dC} = \frac{\Sigma_{dC}}{u} \cdot P_i; P_{pp} = \frac{\Sigma_{pp}}{u} \cdot P_i$$

Ec 4. Probabilidades para cada tipo de efecto. P_{fe} es la probabilidad de interacción fotoeléctrica, P_{dC} es la probabilidad de interacción por Compton y P_{pp} es la interacción por producción de pares. Σ son las secciones eficaces macroscópicas para cada efecto.

En base a las probabilidades que se definen en las ecuaciones 1 y 4 es que se evalúa la ocurrencia de alguna interacción. En el caso que un fotón salga del universo simulado o de una absorción fotoeléctrica se finaliza el análisis de esa trayectoria. Si ocurre una dispersión Compton, se calcula la distribución de Klein-Nishina para estimar la probabilidad de los diferentes ángulos de dispersión posibles. Para el caso en que ocurra una producción de pares, se calculan la aniquilación del positrón y las trayectorias de los dos fotones creados. Finalmente, si no ocurre ninguna interacción, el fotón se desplaza un camino libre medio en la dirección que llevaba. La figura 6 muestra un diagrama del funcionamiento lógico del programa.

Junto con el análisis por secciones eficaces es necesario hacer un análisis de la posición que el fotón ocupa. Este análisis permite cargar los datos de secciones eficaces correspondientes al material en que se encuentra el fotón. También así se puede determinar si el fotón ha llegado a un detector. Además permite saber si un fotón ha salido del recinto simulado, evitando el cálculo asociado a un fotón que nunca llegará al detector.

Actualmente permite el diseño del recinto a simular a partir de algunas figuras geométricas sencillas como cilindros o prismas rectangulares. Además, deben suministrarse al programa los datos de las fuentes, los detectores y los materiales. Todo esto se hace a través de un menú interactivo donde se van introduciendo los datos

necesarios para la simulación. Aquí se introduce también el recinto universo, que es un volumen que encierra a todos los objetos y funciona como último límite al recorrido de un fotón.

La implementación se hizo usando las ventajas del cálculo en paralelo, lo que se denomina “código paralelizado”. Esto significa que el programa utiliza todos los núcleos presentes en un procesador, que sabemos son estándar en la computación actual. Además, esta capacidad hace que el programa se pueda correr en un cluster¹, mejorando el rendimiento y reduciendo el tiempo de cálculo.

Hay una nueva tendencia en el mundo del cálculo computacional intensivo que es la de usar la placa de video de una computadora para hacer cálculos generales. No es una idea muy descabellada, ya que actualmente las placas de video tienen entre 32 y 960 procesadores que trabajan en paralelo.

¹ Es un conjunto de computadoras en red, donde un programa se ejecuta distribuido en todas ellas.

III. PLANTEO DEL PROBLEMA.

El “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” mediante un equipo Gamma Scanner verifica los datos enviados por el generador de residuos acondicionados en tambores de 200 litros. Considerando las formas de tratamiento de los residuos radiactivos, surgen dos grupos definidos: los tambores homogéneos y los inhomogéneos. El Laboratorio cuenta con una calibración para el primer grupo de tipo experimental. El segundo grupo, se encuentra con la dificultad de definir un único patrón representativo que pueda utilizarse en todos los casos para caracterizar cada distribución geométrica de la actividad de cada radionucleido en cada tambor inhomogéneo (sólidos compactados).

Como solución a este problema se planteó la construcción de un modelo del “Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad” que permita obtener espectros sintéticos lo más similares posibles a los obtenidos realmente por el Gamma Scanner en ese mismo laboratorio. Estos espectros serán utilizados para definir curvas de calibración en eficiencia que permitan parametrizar las diferentes distribuciones de actividad presentes en los tambores acondicionados con residuos radiactivos prensados.

IV. PARTE EXPERIMENTAL.

Como ya se mencionó, para la descripción física de la simulación se utilizaron los efectos clásicos de interacción de fotones con la materia: Efecto fotoeléctrico, efecto Compton, producción de pares y aniquilación de pares. Se usó una visión probabilística de estas interacciones a partir de las secciones eficaces de cada interacción.

Las secciones eficaces se obtuvieron con el programa XCOM. Este se puede obtener de la página del NIST. El XCOM genera tablas de secciones eficaces para las interacciones de fotones con la materia en función de la energía del fotón incidente. Estas tablas son construidas por el NIST con los datos, en su mayoría, experimentales de las secciones eficaces aportados por distintos investigadores.

El módulo del programa que se encarga de la simulación permite usar dos tipos de detectores: El *detector ideal* o el *detector pseudo real*. En este contexto, el detector ideal es aquel que absorbe toda la energía del fotón al llegar al mismo. Este detector fue el primero que se incluyó en el desarrollo por su simpleza conceptual y su vasta presencia en la literatura. En cambio, el detector pseudo real registra la energía depositada, teniendo en cuenta las interacciones de los fotones dentro del mismo. Por ejemplo, si un fotón ingresa con una cierta energía al detector que va perdiendo por efecto Compton y encuentra un camino que lo lleva fuera del mismo, la energía depositada es la diferencia entre la que tenía al ingresar y la que tiene al salir.

El módulo de simulación incluye dos tipos de emisión de fotones: *Emisión isotrópica* y *emisión por reducción de varianza* (o mejor llamada de mejora de eficiencia). La utilización de esta mejora necesita que previamente se realice una estimación de la *eficiencia espacial*. La eficiencia espacial se definió como: Cuantas de todas las direcciones iniciales de un fotón que saldría de cualquier punto de una fuente pasan por el detector sobre el número total de direcciones exploradas. O sea, es una fracción que también se calcula por una simulación de Monte Carlo muy sencilla y rápida (es poco costosa en cálculo).

Esta fracción, en el caso límite, es la relación entre el ángulo sólido que contiene las direcciones que van de la fuente al detector sobre el ángulo sólido 4π (todas las direcciones posibles). Este rendimiento depende sólo de la geometría y de la declaración de fuentes y detectores. Esto significa que una vez calculado se puede utilizar todas las veces que se desee, siempre que la geometría no se modifique. La utilidad fundamental de usar esta mejora es reducir el tiempo de cálculo en la simulación.

IV.1 Dentro de la simulación.

En esta parte se describen las decisiones principales que se realizan durante la ejecución de la simulación:

- *Tratamiento y preparación de datos.*
- *Ciclo de cálculo.*
- *Salida de datos.*

IV.2 Tratamiento y preparación de datos.

En esta etapa se configura la simulación en función de los datos de entrada. La siguiente imagen es una captura del programa durante su ejecución.

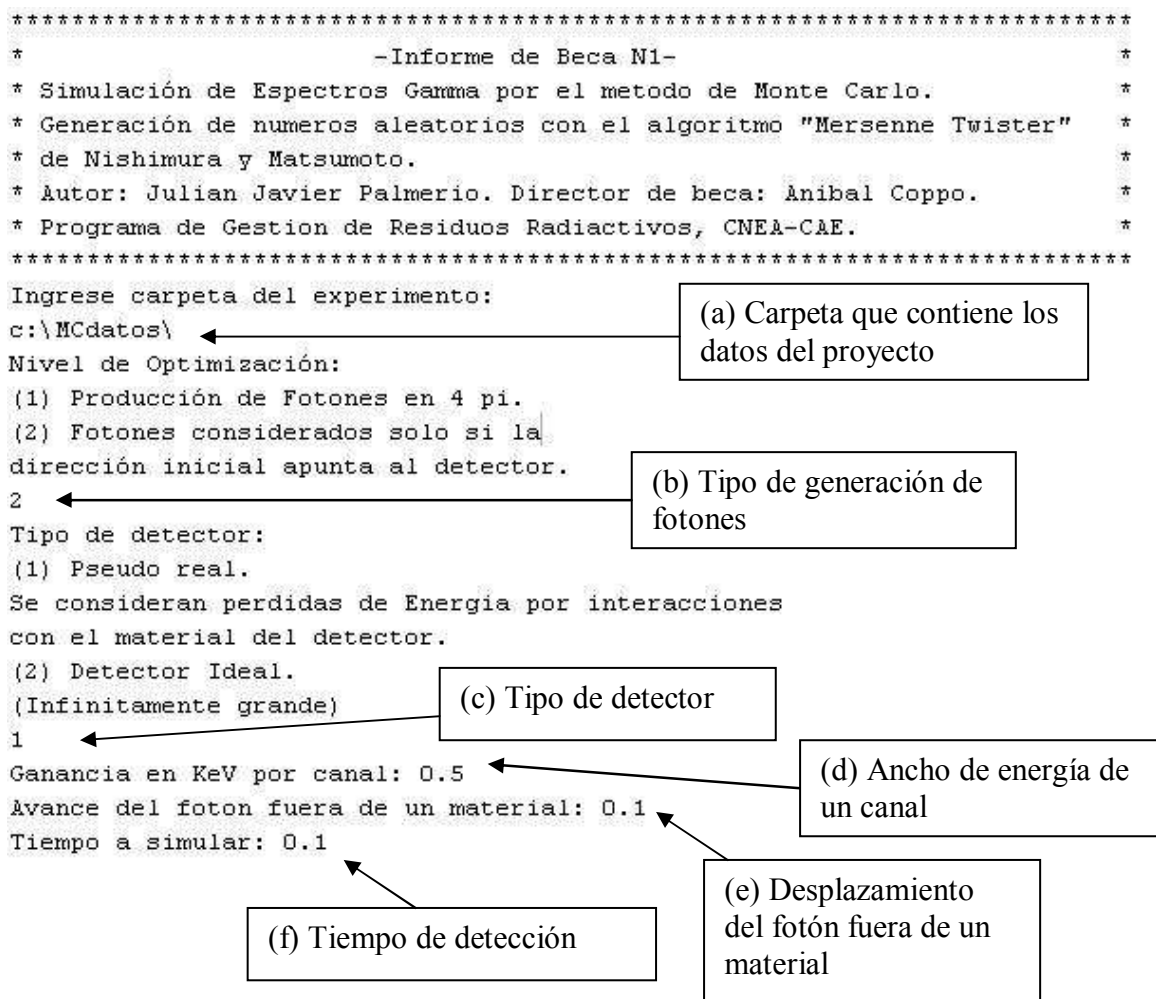


Fig. 5. Pantalla de configuración de la simulación.

Cada campo configura una característica del programa. La carpeta con los datos del proyecto (a), contiene la descripción geométrica y de materiales que se genera antes de la simulación. El tipo de generación de fotones (b), define como se emiten fotones desde la fuente. Para poder usar el modo de fotones emitidos en dirección al detector, es necesario tener previamente el dato de rendimiento espacial (*técnica de mejora de eficiencia*). El tipo de detector (c); como ya se mencionó, es posible configurar el comportamiento como el de un detector infinitamente grande ó como el de un detector de energía depositada (este ultimo es un detector de tipo real). El ancho de energía de un canal (d), es una variable agregada para imitar el funcionamiento estándar de un detector, es asimilable a la ganancia. En un detector real, la cuantificación de señales se hace por canales. En este caso, se eligió usar 4096 canales que es un número usual en la electrónica de medición. Cuando se ingresa el ancho de energía, lo que se hace es definir el intervalo de energías que cada canal va a registrar. El desplazamiento del fotón fuera del material (e), se refiere a la separación entre puntos sobre una dirección, en los que se analiza la pertenecía a algún objeto del recinto universo.

Finalmente, se ingresa el tiempo de medición. Este es el tiempo que va a simularse; es decir, el tiempo que transcurre dentro del universo simulado. No debe confundirse con el tiempo de duración de la simulación, ya que este depende del poder de cálculo de la computadora o del cluster.

IV.3 Ciclo de cálculo.

Esta etapa contiene todo el cálculo asociado a los modelos físicos de interacción de los fotones con la materia. Ya se mencionó que se eligió trabajar en base a secciones eficaces para calcular y decidir sobre los efectos que ocurren. Este es el diagrama de flujo del ciclo de cálculo de la simulación:

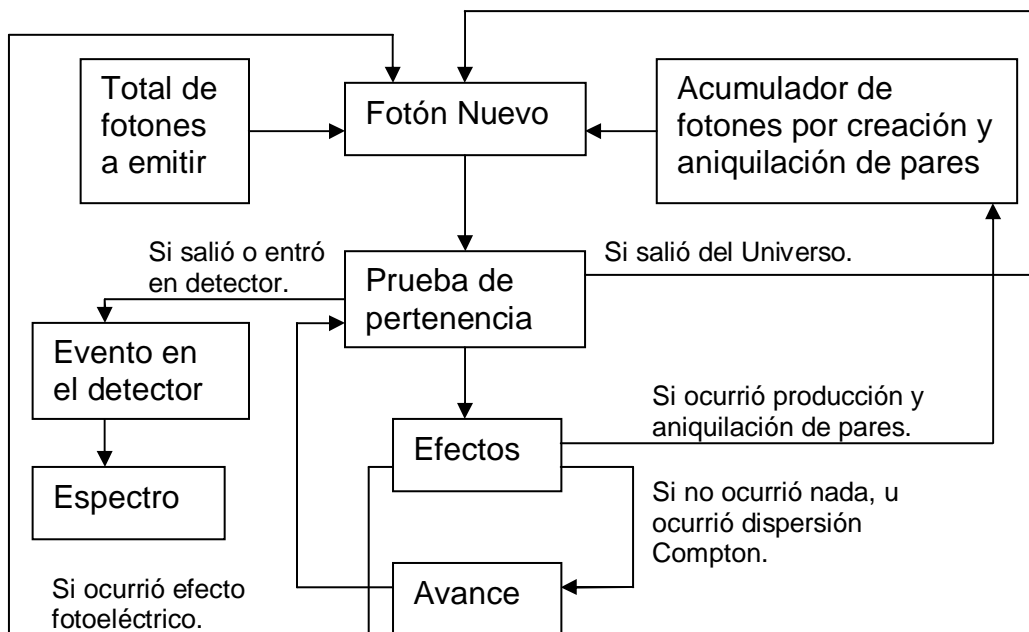


Fig. 6. Diagrama de flujo de la simulación.

Cada ciclo se inicia con un fotón emitido (este hecho requiere el sorteo de un punto y un vector de dirección) de la fuente y va siguiendo las interacciones de ese fotón con los objetos que hay en el recinto Universo. Este ciclo termina si el fotón sale del recinto Universo o si experimenta una absorción fotoeléctrica.

Estos ciclos se envían de a uno a un núcleo de un procesador en una computadora o a cada terminal en un cluster. Esta es la base del cálculo en paralelo, en lugar de esperar que se complete el recorrido de un fotón para empezar otro, se inician tantos recorridos como núcleos de cálculo o terminales hayan disponibles. Cada vez que se completa un recorrido, ese núcleo o terminal comienza a calcular el recorrido de un nuevo fotón.

Durante el recorrido, el fotón podría encontrarse con algún detector, en ese caso se inicia un evento en el detector. Cuando terminan las interacciones con el detector, se calcula la energía depositada como la diferencia entre la energía que ingresó al detector y la que salió del mismo. Esto es lo que se registra en el espectro, se suma una cuenta al canal al que corresponda esa energía. En el caso de trabajar en el modo de detector ideal, los fotones son absorbidos por el detector y se registra una cuenta en el canal al que corresponda su energía.

Como ya se mencionó, las tablas de secciones eficaces se obtuvieron con el programa XCOM del NIST. A través de estas tablas, el programa interpola los datos de secciones eficaces y calcula la probabilidad que ocurran los distintos efectos para una energía determinada del fotón. Luego, en base a un sorteo, se decide cual ocurre. En los

casos en que ocurre efecto fotoeléctrico simplemente termina el recorrido del fotón. En cambio, en el resto de los casos ocurre el avance.

El avance representa el desplazamiento del fotón por el espacio y se calcula a través del camino libre medio que a su vez se calcula con el coeficiente de atenuación total (que es un dato de las tablas obtenidas del NIST). Ahora, la dirección depende del tipo de interacción. Si no ocurre nada, el fotón se desplaza según la dirección que traía. Cuando ocurre dispersión Compton, se calcula la distribución Klein-Nishina para la energía del fotón incidente. Esta distribución se utiliza para estimar la probabilidad de cada ángulo de dispersión. Se usan 315 puntos de la distribución, es decir que el programa trabaja con 315 ángulos posibles de dispersión. Estos puntos cubren los ángulos desde 0 a π .

A continuación se muestra la distribución de Klein-Nishina para distintas energías del fotón incidente en una representación polar:

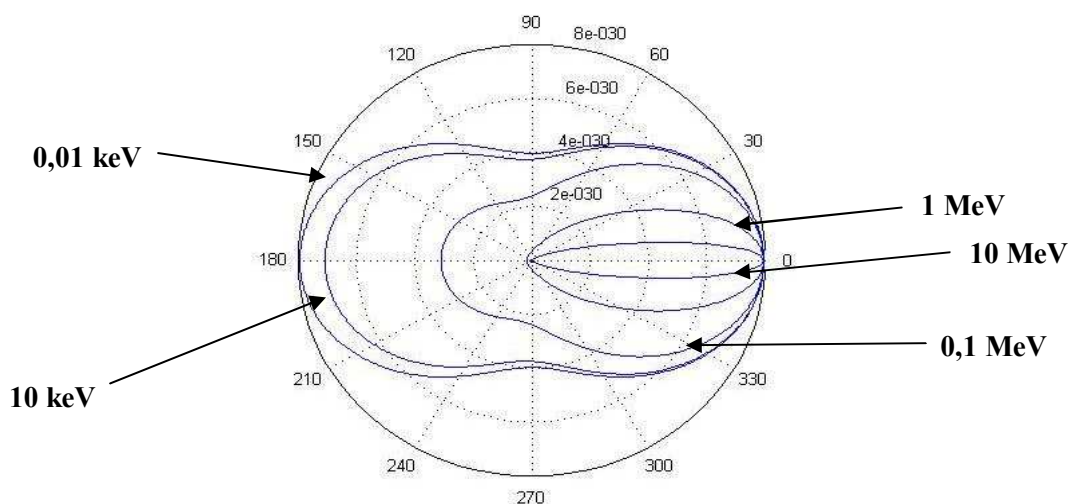


Fig. 7. Distribución de Klein y Nishina para diferentes energías de la partícula incidente.

Una vez calculada la distribución, se realiza un sorteo para decidir cual será la dirección de dispersión. Este ángulo define infinitas direcciones equiprobables de dispersión. El siguiente gráfico muestra algunas direcciones calculadas para un ángulo de dispersión y una dirección inicial dados.

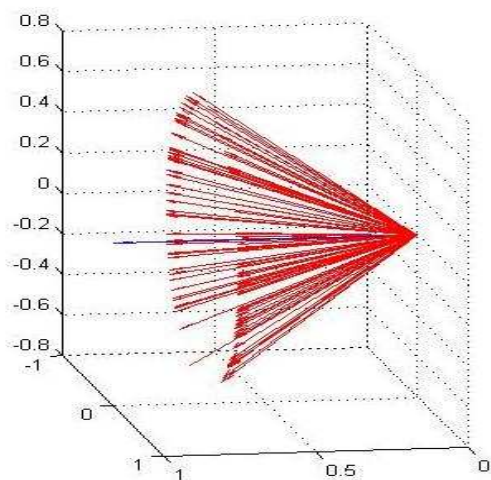


Fig. 8. Algunas direcciones de dispersión Compton para una energía y una dirección de incidencia dados.

Cuando el fotón se mueve por el espacio vacío; es decir, regiones que no pertenecen a ningún objeto del recinto universo, el avance queda determinado por la dirección que ya traía el fotón y el dato de avance ingresado durante la configuración de la simulación. Este valor de avance es el que da precisión a la detección de los diferentes objetos, pero también puede hacer que la simulación sea más lenta. En forma grosera se puede decir que si en el recinto universo hay objetos en los que la mínima dimensión es X , no debería elegirse un valor mayor a $X/100$ para que ese objeto sea bien detectado al explorar una dirección.

Puede ocurrir también la creación de pares; en dicho caso, un fotón con suficiente energía puede en las proximidades de un núcleo transformarse en un positrón y un electrón. El positrón es aniquilado con un electrón del material cuando su velocidad es prácticamente nula emitiendo dos fotones de 511 keV.

Para simplificar el cálculo, se optó por modelar esta situación como un solo caso dentro del programa. Se tiene primero la creación de pares donde ambas partículas salen en sentidos opuestos en una dirección perpendicular a la que llevaba el fotón inicialmente. Luego el positrón se aniquila a unos milímetros de donde se creó, dando lugar a dos fotones de 511 keV que salen en sentidos opuestos en una dirección perpendicular a la que llevaba el positrón. En rigor, deberían modelarse estos fenómenos por dinámica relativista. Incluso podría tenerse en cuenta la aniquilación de un positrón en 3 o más fotones (teniendo en cuenta la probabilidad de ocurrencia). También la posición de aniquilación del positrón debería modelarse mediante la sección eficaz de aniquilación.

IV.4 Salida de datos.

Los datos de salida son los espectros recogidos por los objetos que fueron declarados como detectores durante la configuración del programa. Actualmente el programa construye un archivo *Espectro.txt* en la carpeta de trabajo declarada en la simulación. Este archivo contiene los espectros de todos los objetos del recinto universo, pero los únicos espectros no nulos son los de los detectores. El archivo de salida es un arreglo de datos en donde cada fila contiene la información de un canal y las columnas contienen la información del espectro de un objeto del recinto simulado.

V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Se realizaron simulaciones con dos programas diferentes: MCNP y MATLAB. MCNP es un paquete comercial para realizar simulaciones por Monte Carlo de uso extendido. En cambio, las simulaciones que se realizaron con MATLAB se hicieron con el programa que se desarrolló para tal fin. Se decidió que en la simulación por MCNP se usaran 500 millones de fotones. Para las simulaciones en MATLAB se prefirió usar el límite de 60 segundos de tiempo en el recinto simulado. Para la Geometría 1 se midieron tiempos de cálculo de 26 horas mientras que para la Geometría 2 se midieron tiempos de 5 horas.

Todas las simulaciones (tanto MCNP como MATLAB) se hicieron sobre una computadora con un procesador Intel C2D 6320 con 2 GB de RAM, solo las simulaciones en MATLAB hicieron uso de los dos núcleos presentes en el procesador. De haber ejecutado el código en un procesador Intel i7 (8 núcleos lógicos), el tiempo de cálculo para la simulación más larga de 26 horas hubiera sido de algo más que 6,5 horas.

Se utilizaron dos geometrías distintas en las simulaciones: Geometría 1 y Geometría 2.

La Geometría 1 es una aproximación del “Laboratorio de Control y Verificación de la Calidad”.

La Geometría 2 se incluye con el propósito de obtener y evaluar la forma y el comportamiento del sistema en la generación de espectros (obtenidos con el detector *pseudoreal*). Esta geometría es ficticia y no pretende imitar la realidad. La misma ha sido utilizada solamente en el programa desarrollado en MATLAB. La idea de incluir esta geometría es la de reducir la atenuación de la radiación. De esta manera se esperan obtener espectros más limpios en los que se puedan ver con claridad los distintos posibles picos.

En todos los casos la fuente se consideró compuesta por ^{137}Cs y ^{60}Co con 2mCi de actividad de cada radionucleido. Esta consideración se hizo en función de la actividad conocida del tambor estándar cementado con ^{152}Eu que se utiliza como patrón en las mediciones en el “Laboratorio de Control y Verificación de la Calidad”. Además, se considera una distribución isotrópica de los mismos dentro de la pasta cementicia.

A continuación se detallan las dimensiones de la Geometría 1. Todas las dimensiones están expresadas en centímetros.

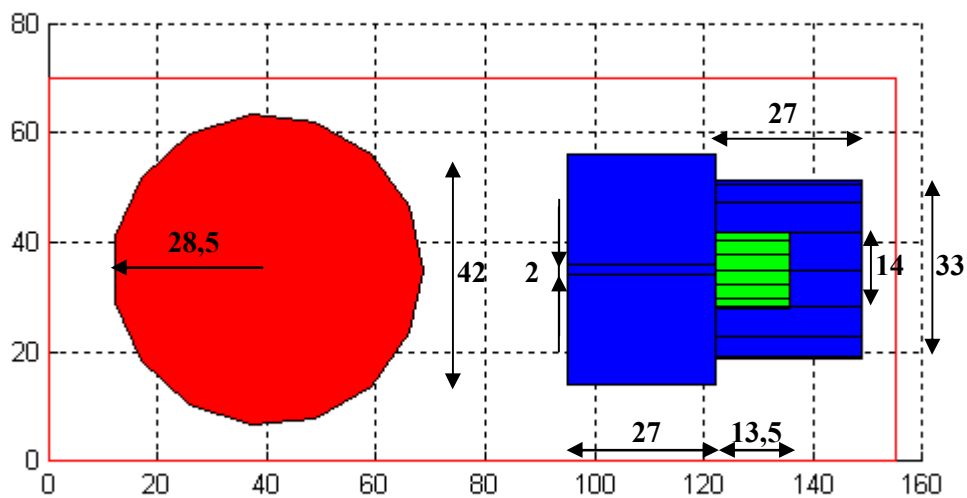


Fig. 9. Vista superior de la Geometría 1.

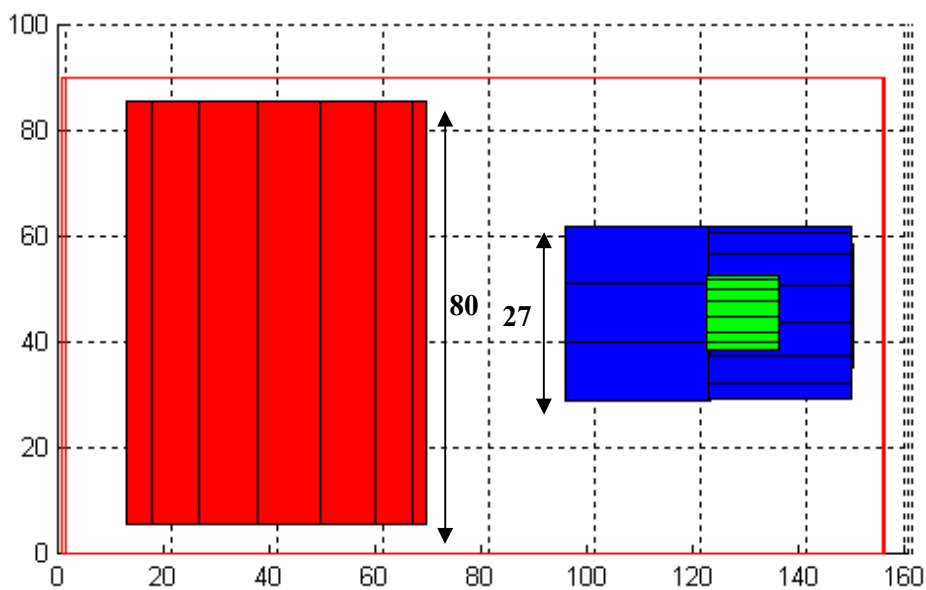


Fig. 10. Vista lateral de la Geometría 1.

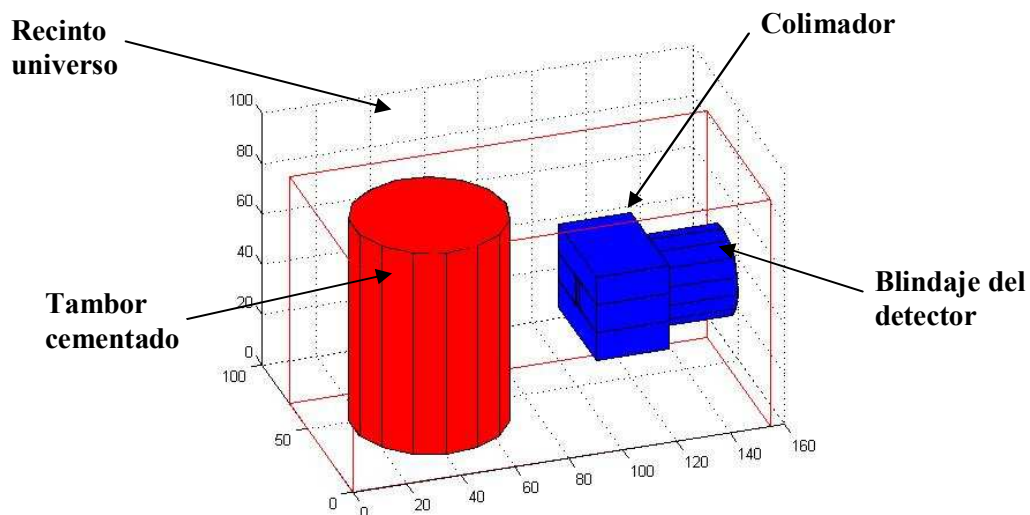


Fig. 11. Geometría 1: Vista general del recinto simulado.

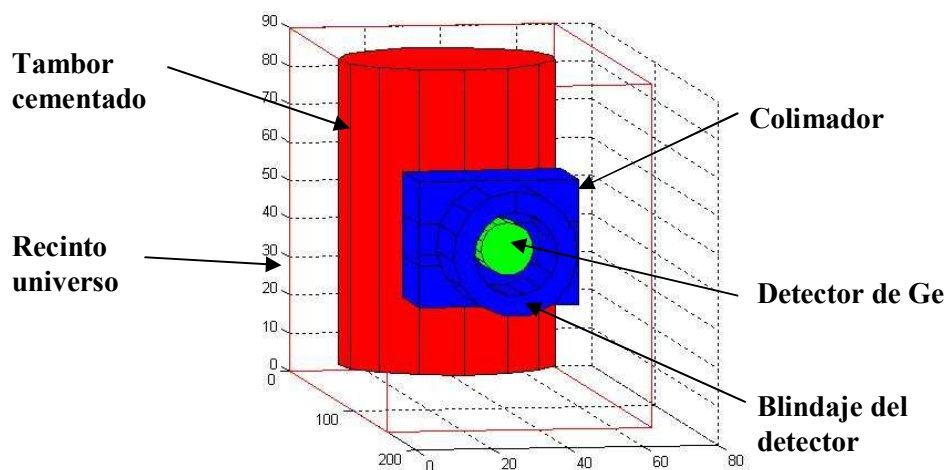


Fig. 12. Geometría 1: Parte trasera del blindaje del detector.

En las figuras siguientes se detallan las dimensiones de la Geometría 2.

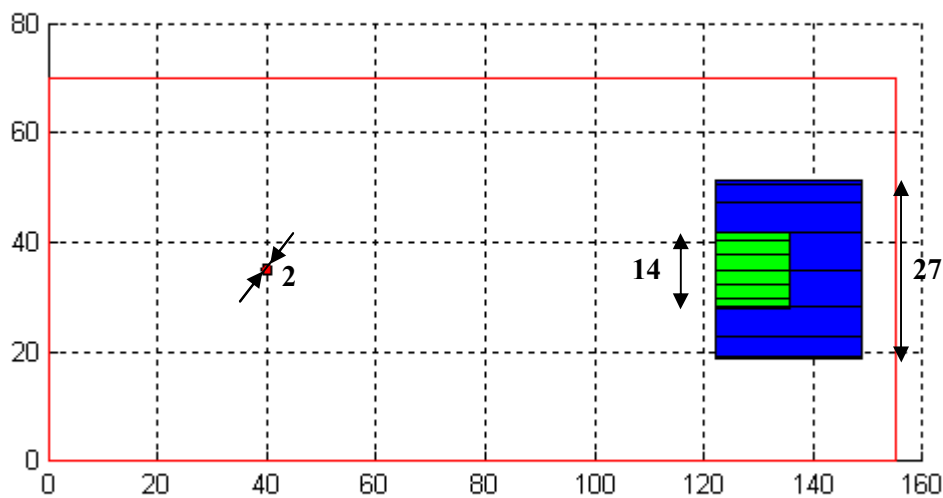


Fig. 13. Vista superior de la Geometría 2.

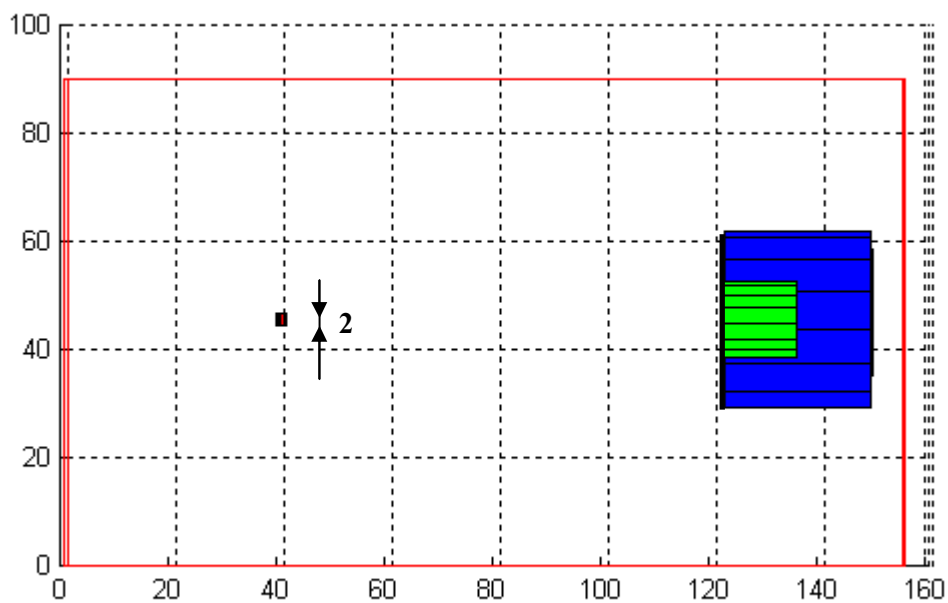


Fig. 14. Vista lateral de la Geometría 2.

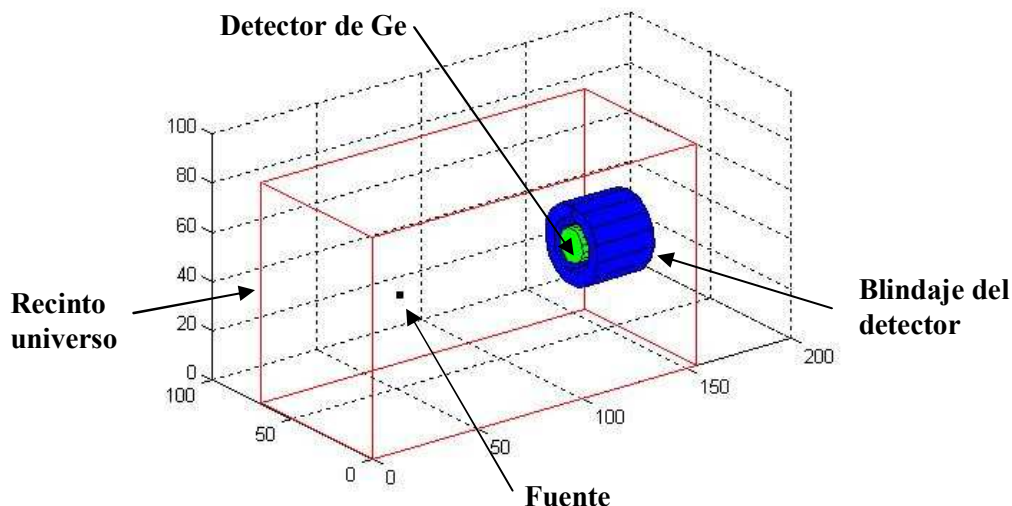


Fig. 15. Geometría 2: Vista general del recinto simulado.

Para la correcta interpretación de los espectros se calculó para la fuente: *energía de retrodispersión*, *energía de borde Compton*, *energía de escape simple* y *energía de escape doble*. De esta forma, fue posible identificar los diferentes efectos en los espectros. La energía de *retrodispersión* se calculó como la energía de dispersión Compton con un ángulo de 180° . La expresión de la misma es la siguiente:

$$E_R = \frac{E_F}{1 + \frac{(1 - \cos \theta)E_F}{m_0c^2}}$$

Ec. 5. E_R es la energía de retrodispersión. E_F es la energía del fotopico.
 θ es el ángulo de dispersión.
 m_0c^2 es la energía de la masa en reposo del electrón.

La energía de *borde Compton* se calculó como:

$$E_B = E_F - E_R$$

Ec. 6. E_B es la energía de borde Compton. E_R es la energía de retrodispersión.
 E_F es la energía del fotopico.

La energía de *escape simple* y *escape doble* se calculó como:

$$E_S = E_F - 511KeV$$

$$E_D = E_F - 1022KeV$$

Ec. 7. E_S es la energía de escape simple. E_D es la energía de escape doble.
 E_F es la energía del fotopico.

En la siguiente tabla se encuentran las energías de los posibles picos que se podrían encontrar en un espectro real y en las simulaciones.

E_F	661,657 keV	1173,237 keV	1332,501 keV
E_R	184,32 keV	209,812 keV	214,390 keV
E_B	477,34 keV	963,43 keV	1118,11 keV
E_S	-	662,237 keV	821,201 keV
E_D	-	151,237 keV	310,501 keV

V.1 Simulación del espectro gamma mediante el código MCNP en la Geometría 1.

Aquí se muestran los resultados de la simulación obtenidos con MCNP.

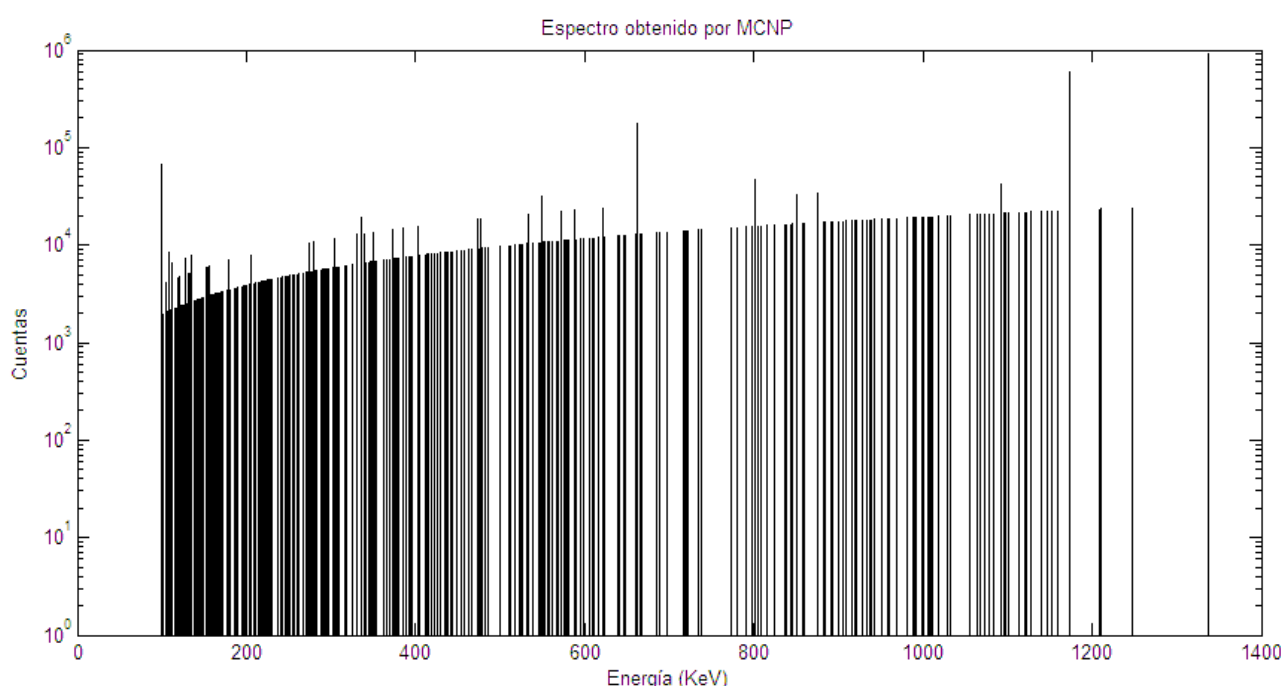


Fig 16. Espectro obtenido por MCNP.

En estos espectros se identifican claramente los fotopicos o picos de energía plena, el resto de los picos no parecen corresponder a ninguno de los efectos esperados en un espectro gamma.

V.2 Simulación del espectro gamma mediante el código MATLAB en la Geometría 1.

Aquí se muestran los resultados de la simulación obtenidos en MATLAB con el detector *ideal*.

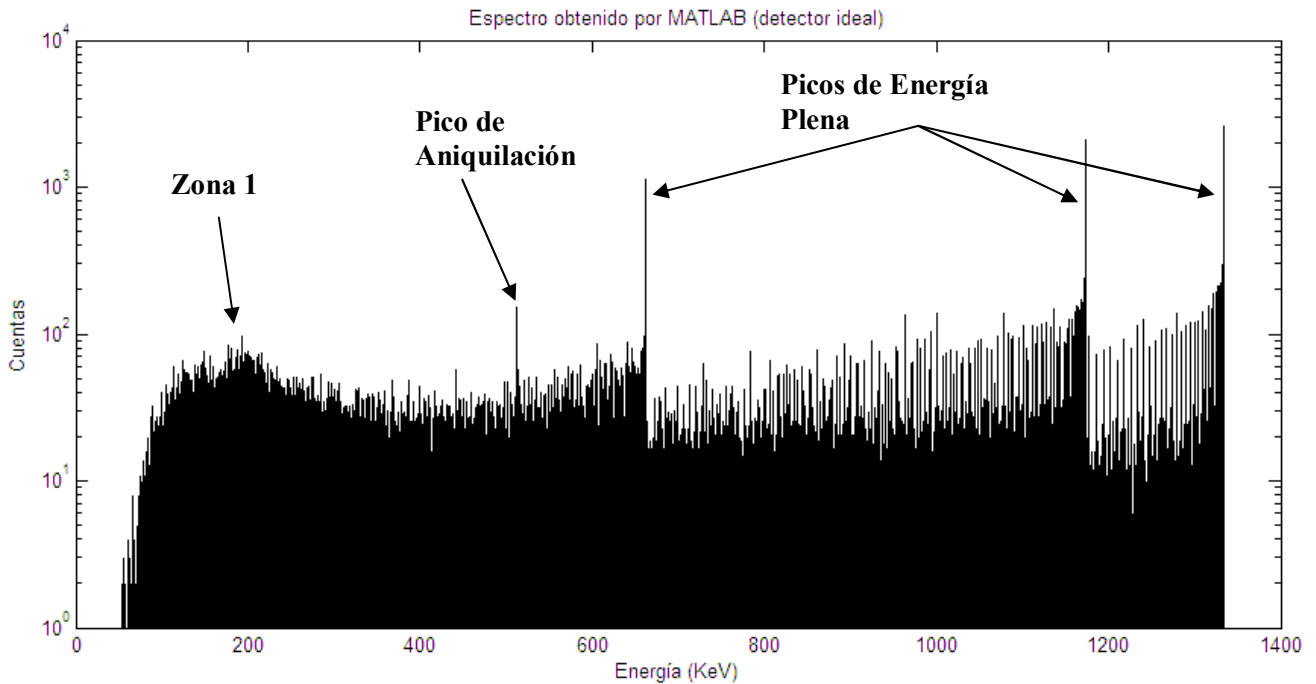


Fig 17. Espectro obtenido por MATLAB (detector ideal).

En estos espectros no se distinguen las energías de: *Borde Compton*, *escape simple* o *escape doble*. Este hecho, que podría parecer un error, es coherente con la idea de detector ideal. Este detector absorbe la totalidad de la energía de los fotones que llegan a él; por esta razón, no se ven las energías resultantes del escape de fotones del mismo.

En cuanto a la Zona 1, podrían ser las distribuciones Compton generadas dentro de la fuente atenuadas en la misma.

Aquí se muestran los resultados de la simulación obtenidos en MATLAB con el detector *pseudoreal*.

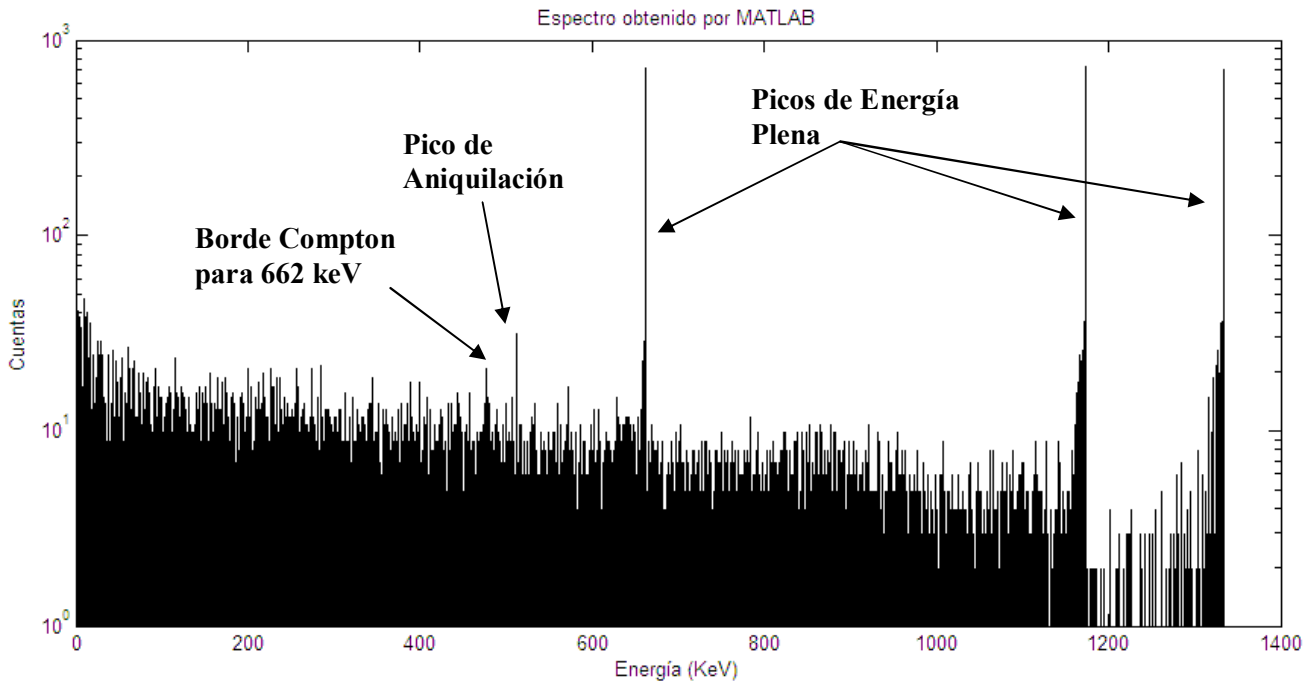


Fig 18. Espectro obtenido por MATLAB (detector pseudoreal).

En estos espectros pueden identificarse los fotopicos. Claramente se identifica la energía de aniquilación y a un poco menos de energía lo que posiblemente sea el borde Compton debido al ^{137}Cs .

V.3 Simulación del espectro gamma mediante MATLAB en la Geometría 2.

Aquí se muestran los resultados de las simulaciones realizadas sobre la Geometría 2 en MATLAB con el detector ideal.

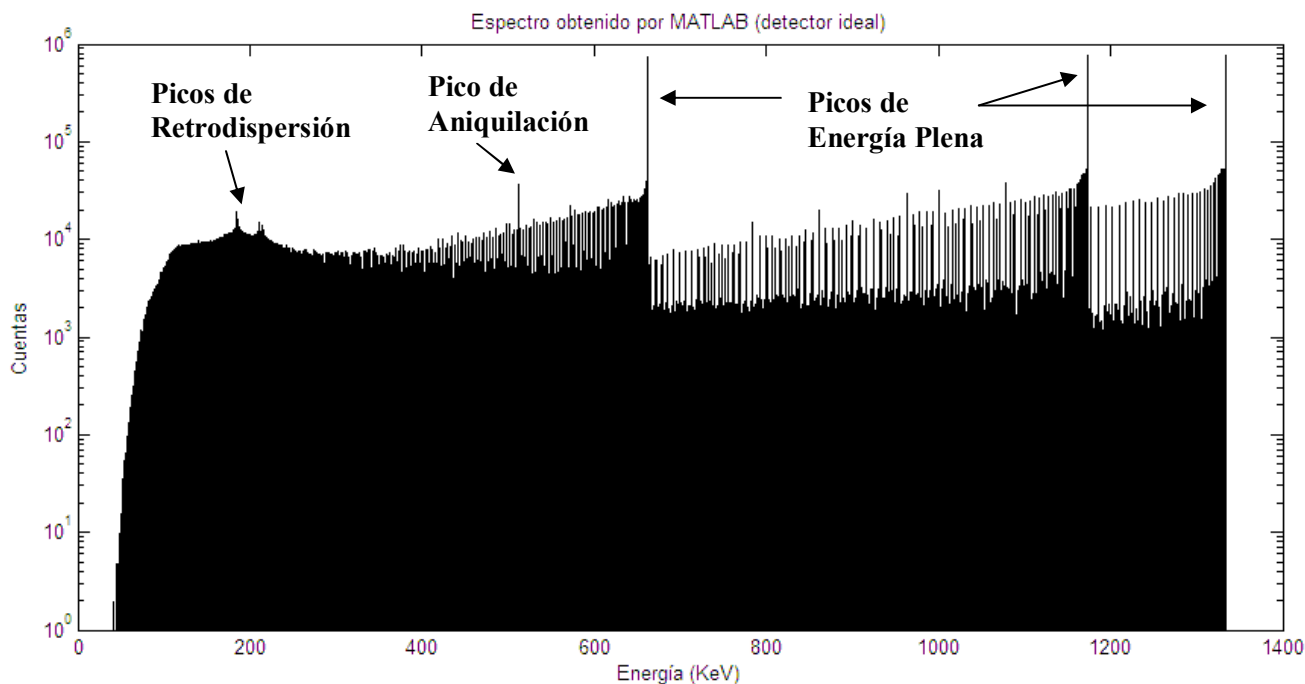


Fig 19. Espectro obtenido por MATLAB (detector ideal).

En estos espectros se observan con claridad los fotopicos, el pico de aniquilación y los picos correspondientes a la retrodispersión de fotones con energías de: 661,657 keV, 1173,237 keV y 1332,501 keV. Estos picos no pueden originarse en el detector ya que este es *ideal*. Por esta razón, y por que en la Geometría 2 hay pocos objetos, se podría pensar que se produjeron en el interior de la fuente. A continuación se muestran los resultados obtenidos con el detector *pseudoreal* en la Geometría 2.

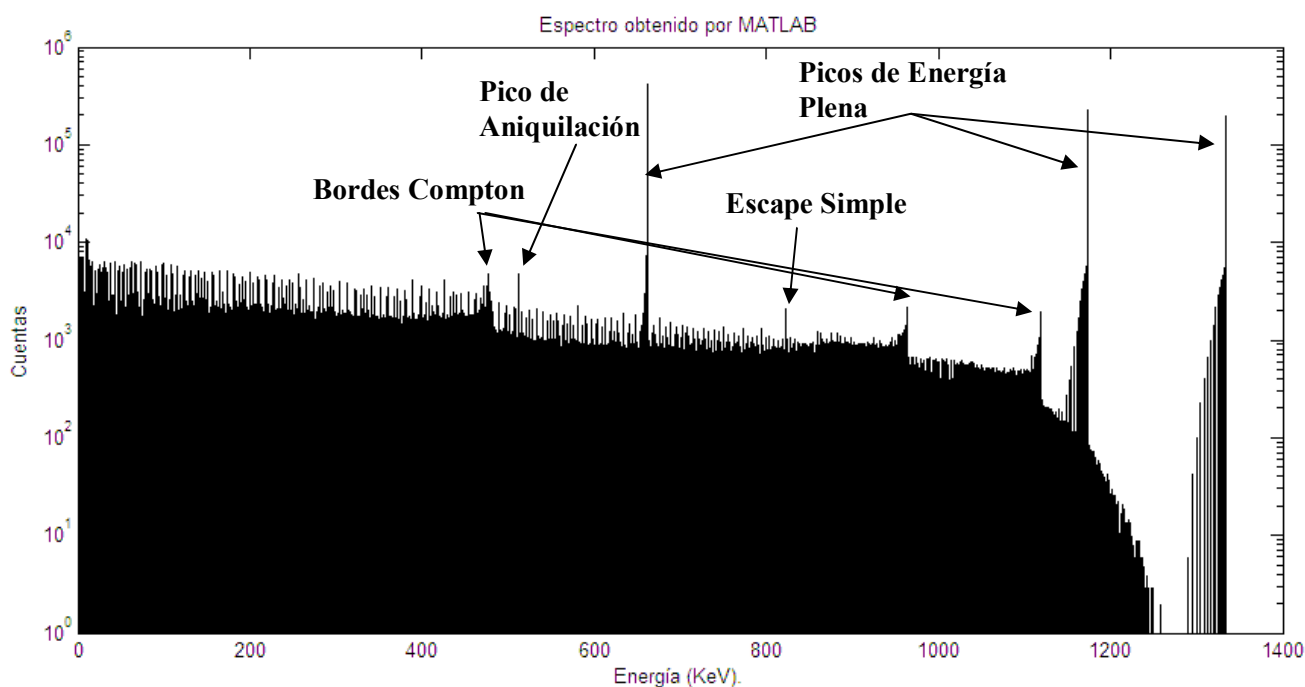


Fig 20. Espectro obtenido por MATLAB (detector pseudoreal).

Aquí se observan con claridad los efectos de aniquilación, escapes simples y bordes Compton para los fotones gamma de ^{137}Cs y ^{60}Co . Hay que tener en cuenta que la energía depositada en un escape simple de un fotón de 1173,237 keV (o sea 662,237 keV) es casi idéntica a la de un fotón de ^{137}Cs (661,657 keV). Por esta razón, es esperable que las cuentas del escape simple hayan quedado junto con las del fotopico de ^{137}Cs . La dispersión Compton no permite juzgar la aparición de los picos de retrodispersión o de picos de escape doble (poca claridad en bajas energías).

Se incluye además, a modo de ejemplo, un espectro real obtenido en con el Gamma Scanner en el “Laboratorio de Control y Verificación de la Calidad”.

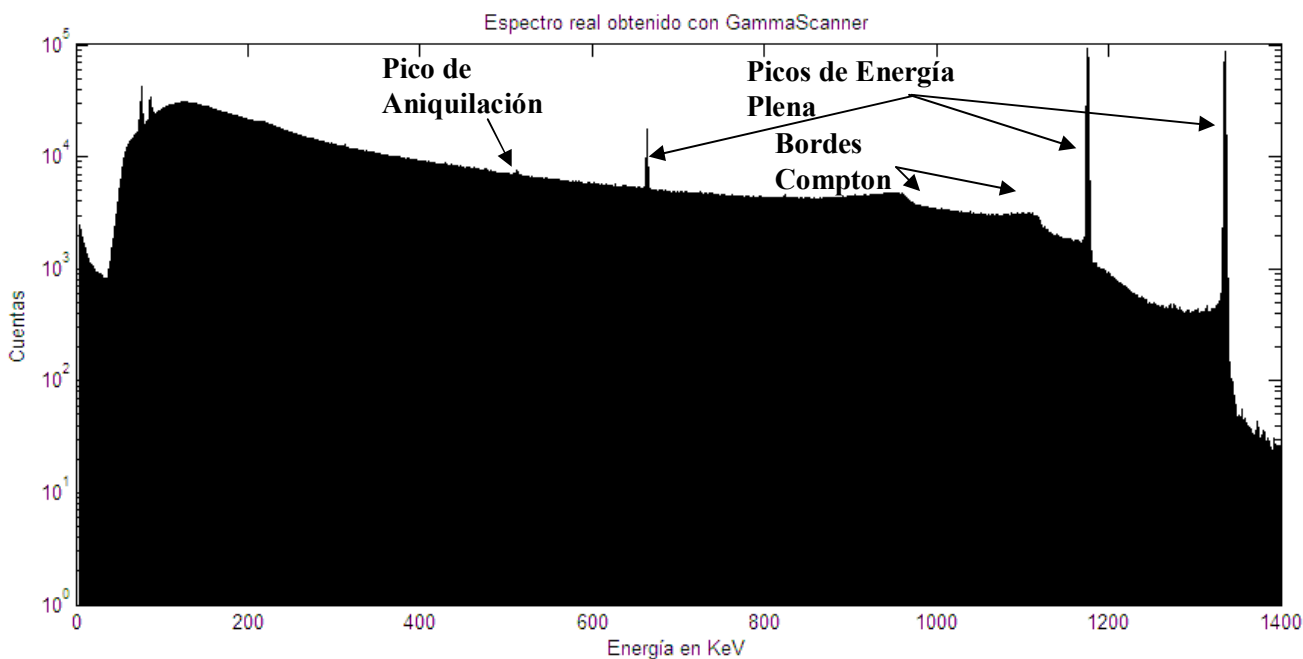


Fig 21. Espectro obtenido por Gamma Scanner.

Este espectro corresponde a las actividades de ^{137}Cs y ^{60}Co . A la fecha de medición (29/05/2006) habían aproximadamente 9,8 mCi de ^{60}Co y 1,5 mCi ^{137}Cs . En el espectro se aprecia la menor actividad de ^{137}Cs . También se observan los fotopicos, los bordes Compton correspondientes a los picos de ^{60}Co , el pico de aniquilación y los picos de retrodispersión. El borde Compton correspondiente al ^{137}Cs seguramente está cubierto por el Compton de los picos de ^{60}Co .

VI. CONCLUSIONES.

La simulación por Monte Carlo es una técnica muy útil para la generación de espectros sintéticos. En el caso del “Laboratorio de Control y Verificación de la Calidad” hizo evidente la dificultad que introduce la atenuación al observar los espectros de tambores cementados.

El desarrollo del programa, modelando la física del problema desde cero, permitió obtener espectros de apariencia más similar a los colectados en el Laboratorio de Verificación y Control de la Calidad que los obtenidos mediante MCNP. Otra característica que puede ser útil en estos detectores simulados es que al trabajar en procesos paralelos las trayectorias de los fotones, pueden discriminarse perfectamente todos los fotones que llegan al mismo. Como consecuencia de este tratamiento no existen tiempos muertos (no hay ventanas de integración). Este aspecto será modificado cuando se incluya en el modelo la cadena electrónica asociada a la detección.

El desarrollo en base a MCNP es mucho más veloz y capaz; sin embargo, para todos aquellos problemas que se puedan describir mediante figuras geométricas simples como cilindros y prismas rectangulares e interacciones de fotones con la materia (como ocurre en la espectrometría gamma), la opción de usar el desarrollo escrito mediante el código MATLAB es válida.

Sería interesante en el futuro poder mejorar la velocidad de la simulación (quizás usando la GPU²), además de añadir más efectos a la misma (por ejemplo fluorescencia de rayos X). Otra mejora sería incluir el modelado de la influencia de la electrónica en el espectro. También es necesario mejorar la librería de geometrías que se usa en la construcción de objetos con el fin de lograr una descripción más precisa de los cuerpos presentes en el recinto de medición. Esta mejora es de gran utilidad también en el modelado geométrico del detector de Germanio, pieza clave para la obtención de espectros a ser utilizados en las diferentes calibraciones de eficiencia. Otro aspecto que necesita trabajo es la implementación de criterios estadísticos de estabilidad, que permitan juzgar con claridad la tendencia del espectro. Esta técnica puede ser útil como complemento de las mediciones experimentales, tanto como forma grosera de explorar el aspecto posible de un espectro como para hacer predicciones precisas. Esta última línea de trabajo sería posible caracterizando con precisión el recinto de medición y la fuente (es decir, ajustando el modelo a las condiciones y a los resultados experimentales).

Aunque este desarrollo necesita ser mejorado y probado extensamente, es al menos un comienzo. De esta manera se sientan las bases para el desarrollo simulaciones de transporte por Monte Carlo transparentes, donde el usuario realmente tiene el control.

² Graphic Processor Unit

Bibliografía.

- [1] Knoll, G. F. “Radiation Detection and Measurement”. *John Wiley & Sons*, 1978.
- [2] Gilmore, G. and Hemingway, J. D. “Practical Gamma Ray Spectrometry”. *John Wiley & Sons*, 1995.
- [3] Fishman, G. S. “Monte Carlo: Concepts, Algorithms and Applications”. *Springer*, 1996.
- [4] Matsumoto, M. and Nishimura, T. “Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator”. *Keio University/Max-Planck-Institut für Mathematik*, 1998.

Agradecimientos.

- A Aníbal Coppo, por su ayuda en espectrometría gamma y su confianza en este desarrollo.
- Al Lic. Sergio Strocovsky, por su ayuda en la comprensión física de los espectros gamma.
- Al Grupo de Protección Radiológica y Seguridad Nuclear (Unidad de Actividad Combustibles Nucleares) del Centro Atómico Constituyentes, por prestarme su Core Quad para hacer las primeras simulaciones.
- A Pablo Alfaro Agüero, por su aporte en la simulación por MCNP.
- A Fernando Lage por enseñarme a usar MATLAB.
- A mis profesores de la especialización en radioquímica por abrirme las puertas a estos conocimientos.