
Verificación del código PENG4 para transporte de
electrones con *Dose Point Kernels*

Andrea Roche Fernández

Trabajo Fin de Grado

Dirigido por Dr. Miguel Antonio Cortés Giraldo



Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Facultad de Física

Universidad de Sevilla

6 de julio de 2023

Agradecimientos

Este trabajo no habría sido posible sin la dedicación y gran ayuda de mi tutor, Miguel Antonio Cortés Giraldo, a quien estoy muy agradecida por su paciencia, amabilidad y total disponibilidad siempre que lo he necesitado durante estos meses.

En mi ambiente personal, quiero agradecer tanto a mi familia como a mis amigos, por estar ahí y acompañarme en el desarrollo de este trabajo. En especial, a mis compañeros y amigos de la universidad, que han vivido de cerca mi esfuerzo, aguantándome incluso los lunes por la mañana. A mis amigas, Alba y Ángela, por apoyarme y permanecer a mi lado en todo momento. A mi abuela, tios y primos, por comprender mi gran dedicación académica y motivarme a estudiar mi pasión. A mi pareja, Roger, por confiar plenamente en mi y animarme diariamente. Pero sobre todo, a mi madre, María Jesús; y a mi hermana, Ángela, que son los pilares fundamentales de mi vida.

Resumen

En este trabajo se presenta una verificación del código Monte Carlo PENG4 para transporte de electrones por debajo de 1 MeV. Por un lado, la precisión de este método es de gran utilidad en investigación clínica, permitiendo estudiar técnicas novedosas de tratamientos y ajustar modelos analíticos de los sistemas de planificación. Por otro lado, el estudio de electrones resulta de especial interés, ya que siempre están involucrados en los tratamientos de radioterapia, sea directamente o como radiación secundaria. Además, los electrones secundarios producidos suelen encontrarse generalmente por debajo de 1 MeV.

Con estos propósitos, se han simulado haces de electrones monoenergéticos a través de un medio material con simetría esférica, utilizando dos códigos distintos, GEANT4 y PENG4. Como método de comparación y análisis se ha empleado la estimación de *Dose Point Kernels* (DPK). En primer lugar, se han estudiado distintas listas de física de GEANT4, `emstandard_opt4`, `emlivermore` y `empenelope`, obteniendo discrepancias relativas inferiores al 5 % y concluyendo que la más precisa en general se corresponde con `emstandard_opt4`. No obstante, la más adecuada siempre dependerá de las características del experimento considerado, como el material y la energía inicial de los electrones. En segundo lugar, se han optimizado los parámetros característicos de PENG4, analizando visualmente la influencia de cada uno de ellos sobre las simulaciones y concluyendo que los valores óptimos se corresponden con $C_1 = C_2 = 0.01$ y $W_{CR} = W_{CC} = E_{ABS} = 10^2$ eV. Por último, se han comparado ambos códigos entre sí, obteniendo diferencias relativas por debajo del 5 % en casi todos los casos, que demuestran la versatilidad y robustez de PENG4.

Índice

Agradecimientos	I
Resumen	II
1 Introducción	1
1.1 Contextualización	1
1.2 Mecanismos de generación de electrones	3
1.3 Interacción de los electrones con la materia	5
1.4 El método Monte Carlo	7
1.4.1 Simulación Monte Carlo del transporte de radiación	9
1.5 Códigos Monte Carlo empleados	10
1.5.1 GEANT4	10
1.5.2 PENG4	12
2 Metodología	19
2.1 Simulaciones	19
2.1.1 GEANT4	21
2.1.2 PENG4	23
2.2 Metodología para comparar	27
3 Resultados y discusión	29
3.1 GEANT4	29
3.2 PENG4	39
3.3 GEANT4 vs PENG4	42
4 Conclusiones	47
Bibliografía	49
Lista de Acrónimos	52
Anexo	53

Índice de figuras

1	Mecanismos de interacción de los electrones con la materia.	6
2	Ilustración del método <i>Random-Hinge</i> [23].	18
3	Modelo esférico de las simulaciones en agua, mostrándose esquemáticamente la traza de un e^- primario lanzado desde el origen.	20
4	DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en agua con distintos valores de E_0	30
5	DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST}	34
6	DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en hueso con distintos valores de E_0	37
7	DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en hueso con distintos valores de E_0 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST}	38
8	Influencia de C_1 y C_2 sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 2 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 10$ keV.	40
9	Influencia de E_{ABS} sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 3 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 10$ keV.	41
10	Influencia de W_{CC} y W_{CR} sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 4 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 1000$ keV.	42
11	DPK de las simulaciones con <code>emstandard_opt4</code> de GEANT4 y los parámetros óptimos de PENG4, para un haz de e^- en agua con distintos E_0	43
12	DPK de las simulaciones con <code>emstandard_opt4</code> de GEANT4 y los parámetros óptimos de PENG4, para un haz de e^- en hueso con distintos E_0	45

Índice de tablas

1	Parámetros iniciales empleados en PENG4.	25
2	Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de C_1 y C_2 , $E_0 = 10$ keV.	25
3	Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de E_{ABS} , $E_0 = 10$ keV.	26
4	Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de $W_{CR} = W_{CC} =$ E_{ABS} , $E_0 = 1000$ keV.	26
5	Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.	31
6	Errores relativos de los máximos presentados en la tabla 5 con respecto a EGSnrc.	31
7	Valores de r_0 computados para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.	33
8	x_{max} mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 , cada lista de física de GEANT4 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST}	35
9	Errores relativos de los x_{max} presentados en la tabla 8 con respecto a EGSnrc.	35
10	Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.	36
11	Errores relativos de los máximos presentados en la tabla 10 respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).	36
12	Valores de r_0 computados para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.	38
13	x_{max} mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 , cada lista de física de GEANT4 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST}	39
14	Errores relativos de los x_{max} presentados en la tabla 13 respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).	39
15	Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y los parámetros óptimos de PENG4.	44
16	Errores relativos de los máximos de GEANT4 con <code>emstandard_opt4</code> y PENG4 con los parámetros óptimos en agua respecto a EGSnrc.	44

17	Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y los parámetros óptimos de PENG4.	46
18	Errores relativos de los máximos de GEANT4 con <code>emstandard_opt4</code> y PENG4 con los parámetros óptimos en hueso respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).	46

1. Introducción

1.1. Contextualización

Actualmente, el cáncer sigue constituyendo una de las principales causas de morbi-mortalidad en el mundo. La *International Agency for Reserch on Cancer* estimó que en el año 2020 se diagnosticaron aproximadamente 18.1 millones nuevos casos de cáncer a escala global, con alrededor de 9.9 millones de muertes relacionadas; y que aumentará a 28 millones de nuevos casos al año en 2040, estimándose más de 16 millones de muertes. Concretamente en España, la mortalidad representa un 41 % de la incidencia de esta enfermedad. Sin embargo, es cierto que la supervivencia de los pacientes se ha duplicado en los últimos 40 años en nuestro país y se espera que continúe incrementando en los próximos gracias a los extraordinarios avances en investigación [1]. A pesar de numerosos progresos, faltan tratamientos eficaces para algunas formas de la enfermedad, como el cáncer de hígado, páncreas y encéfalo, entre otros. Asimismo, existen pacientes que se han recuperado exitosamente, pero experimentan efectos adversos a largo plazo [2].

Los procedimientos más empleados en el tratamiento de esta patología son la cirugía, la quimioterapia y la radioterapia; incluso combinándose en ocasiones para aumentar la probabilidad de eliminar al tumor. La radioterapia es una técnica empleada desde 1953 que consiste en la utilización de radiación ionizante con el fin de destruir las células cancerígenas. Este tipo de radiación puede ocasionar daños en puntos de las células, como sus moléculas de ADN, mediante la deposición local de energía, descrita mediante una magnitud denominada dosis [3]. Atendiendo a la forma de aplicación de este tratamiento, se puede distinguir entre radioterapia interna, externa e intraoperatoria.

Por un lado, la radiación de haz interno se coloca dentro del cuerpo. En un método denominado braquiterapia, se colocan semillas de radiosótopos de emisión β^- directamente dentro o cerca del tumor; utilizándose principalmente para tratar el cáncer de próstata.

En cambio, en la radioterapia mediante haz externo, se dirigen haces de radiación desde varias direcciones al centro del blanco para depositar la mayor dosis posible en el tumor. Consiste en un tratamiento local, donde pueden emplearse fotones, protones o electrones en función del tipo de cáncer considerado. En el caso de electrones, su empleo directo se limita a tumores en la piel o cerca de la superficie del cuerpo. Algunos nuevos métodos más

efectivos son la Radioterapia de Intesidad Modulada, o en inglés *Intensity-Modulated Radiation Therapy* (IMRT); la Radioterapia Guiada por Imágenes, o en inglés *Image-Guided Radiation Therapy* (IGRT); y la Radioterapia Estereotáctica (Radiocirugía). Mientras que en la radioterapia intraoperatoria se emplea radiación durante la cirugía para extirpar un tumor [4].

Resulta esencial continuar la investigación en el tratamiento del cáncer, mejorándose las técnicas empleadas y entendiendo aún con más detalle esta patología. Para ello, es imprescindible abordarla también desde un punto de vista físico. En las terapias mencionadas se emplea radiación, donde los electrones pueden producirse espontáneamente y de forma inducida. Es decir, en tratamientos como la braquiterapia, se utiliza directamente una fuente natural de electrones. Mientras que en otras, como la radiación de haz externo mediante fotones o incluso la protonterapia, aparecen como radiación secundaria.

De esta forma, una de las motivaciones de este trabajo surge de manera natural, el estudio del transporte de electrones a través de un material mediante simulación Monte Carlo, debido a su gran utilidad en el desarrollo de la radioterapia y física médica. Especialmente en investigación, donde la precisión de esta técnica es fundamental en el diseño de colimadores, la evaluación de riesgo de un segundo cáncer inducido por la propia radiación y el ajuste de modelos analíticos empleados en sistemas de planificación.

Asimismo, caben destacar otras áreas de aplicación. En medicina nuclear se utilizan radiofármacos, medicamentos con un isótopo radiactivo, para el diagnóstico y tratamiento de múltiples enfermedades [5]. Por otro lado, en dosimetría y metrología radiológica se mide el grado de exposición a radiación ionizante con el objetivo de conocer sus límites y consecuencias. Su importancia reside tanto en la protección de los investigadores y trabajadores expuestos a radiación como en la cuantificación de las dosis recibidas por los propios pacientes [6]. También resultan de interés los microscopios electrónicos, donde se utilizan electrones para formar imágenes de objetos muy pequeños, y los detectores de radiación; donde los portadores de carga de la misma son estas partículas ligeras [7].

A continuación se explica la organización de este trabajo. El resto del capítulo se ha dedicado a una introducción teórica, profundizando en los mecanismos de producción de electrones, la interacción de estas partículas con la materia y la simulación Monte Carlo del transporte de radiación. Dado que hemos trabajado con dos códigos distintos,

GEANT4 y PENG4, se incluye un capítulo para abordarlos desde un punto de vista más técnico. En la metodología, se exponen detalladamente las simulaciones realizadas y los observables obtenidos, además de los procedimientos empleados para la comparación de ambos códigos. El siguiente capítulo se dedica a los resultados y discusión, analizando exhaustivamente distintas observaciones y realizando finalmente la verificación de PENG4. Por último, se presentan las conclusiones de este trabajo.

1.2. Mecanismos de generación de electrones

Los núcleos pueden someterse a diversos procesos que resulten en la emisión de radiación. Por un lado, en un proceso radiactivo, un núcleo de átomos inestables se desintegra en uno o varios núcleos hijos o pasa a un estado de menor energía mediante la emisión de la misma. Existe tanto radiactividad natural, que prescinde de la intervención humana, como artificial. En cambio, en una reacción nuclear, el núcleo interactúa con otro o una partícula, siendo la radiación uno de los productos finales [8].

Dado que la radiación no ionizante, de los teléfonos móviles o ultrasonidos, se considera no dañina para tejidos biológicos; a pesar de seguir siendo motivo de investigación, nos centraremos en la ionizante. Desde una perspectiva física, se cede energía al medio mediante la excitación de átomos y moléculas, y la ionización, ya sea mediante partículas cargadas directamente ionizantes o partículas neutras indirectamente ionizantes. Estos efectos, especialmente la ionización, pueden causar daño celular en organismos vivos [9].

La radiación puede ser en cualquier caso electromagnética, como rayos X y rayos γ , o corpuscular, como partículas cargadas pesadas o electrones, entre otros. Además, esta puede ser originada tanto en el núcleo en sí mismo, como en la nube de electrones de alrededor, dependiendo del proceso considerado.

Cabe destacar las posibles fuentes de producción de electrones, tanto de manera espontánea como inducida. Mientras que el resto de decaimientos posibles excede los límites del trabajo, pudiéndose encontrar en [8]. La principal fuente natural de electrones rápidos se corresponde con un radioisótopo que decae por emisión β^- . En un núcleo rico en neutrones, uno puede convertirse en un protón que permanece ligado al núcleo mediante

este proceso gobernado por la interacción débil, emitiéndose un electrón y antineutrino,



Además, se caracteriza por una energía de decaimiento Q , que se reparte entre la partícula β y el $\bar{\nu}_e$; ya que la energía de retroceso del núcleo es despreciable. Por ello, su espectro de energías es continuo, siendo este decaimiento una fuente de electrones con distintas energías.

Otras interacciones dan lugar a electrones monoenergéticos. Por un lado, los electrones de conversión interna son un proceso competitivo con la emisión gamma, en los que la energía de excitación nuclear es directamente transferida a un electrón atómico, habitualmente de las capas más internas, en vez de emitida como un fotón. Por otro lado, los electrones Auger son parecidos a los de conversión interna. Sin embargo, en este caso la excitación energética se origina en el átomo y se transfiere a uno de los electrones de las capas más externas; constituyendo un proceso alternativo a la emisión de rayos X [10].

Como ya se ha mencionado, pueden producirse electrones de manera inducida. Es decir, como resultado de los mecanismos de interacción de otro tipo de radiación, fotones o partículas cargadas pesadas, con la materia. En el último caso predomina la interacción coulombiana, especialmente colisiones inelásticas con los electrones atómicos, que pueden producir la ionización del medio; y por ende, la emisión de electrones. En cambio, los procesos más relevantes de la radiación gamma son los siguientes [7]:

- **El efecto fotoeléctrico**, donde toda la energía del fotón incidente es absorbida por un electrón ligado que queda libre.
- **El efecto Compton**, donde parte de la energía del fotón incidente es absorbida por un electrón débilmente ligado que queda libre. Mientras que la energía restante se emplea en emitir un nuevo fotón gamma en una dirección distinta.
- **Creación de pares**, donde el fotón incidente se convierte espontáneamente en un par electrón-positrón en la vecindad de un núcleo debido a la interacción de la fuerza de coulomb. Para ello, es necesario que el fotón tenga una energía superior a 1.022 MeV. Además, eventualmente el positrón se aniquila con un electrón libre y se produce la emisión de dos fotones gamma de 511 keV cada uno.

1.3. Interacción de los electrones con la materia

Los electrones pierden energía de manera aproximadamente continua mediante fundamentalmente colisiones coulombianas, es decir, procesos debidos a la interacción electromagnética de las partículas incidentes con los electrones y núcleos del medio. Como los electrones son leptones, no experimentan la interacción fuerte. Se pueden distinguir distintos mecanismos, mostrados esquemáticamente en la figura 1, según interaccionen elásticamente o inelásticamente [11].

Colisiones elásticas

Las partículas cargadas colisionan elásticamente con los átomos del medio, desviándose de su trayectoria y sin producirse ninguna alteración atómica ni nuclear del mismo. Realmente existe una pequeña transferencia de energía del proyectil al blanco, lo que provoca el retroceso de este último. Sin embargo, debido a que la masa de los electrones es muy pequeña y las colisiones elásticas se dan fundamentalmente con los núcleos atómicos, la pérdida de energía promedio de los proyectiles es una fracción pequeña de su energía inicial y puede despreciarse. Estos procesos constituyen la principal causa de las deflexiones angulares en las trayectorias de los electrones [11].

Colisiones inelásticas

■ Con electrones atómicos

Las partículas cargadas interaccionan con los electrones atómicos del medio de manera inelástica, transfiriéndoles pequeñas cantidades de energía. Estas pueden provocar principalmente la ionización del átomo, en la que el electrón atómico escapa totalmente de la atracción del núcleo; o su excitación, donde el electrón se promueve a un estado más energético. Además, también pueden aparecer electrones δ . Es decir, electrones de alta energía arrancados por uno incidente, que producen una traza propia de ionización separada de la inicial [9].

■ Con campo coulombiano nuclear

La radiación de frenado o de *bremstrahlung* es aquella producida por la deceleración de una partícula cargada desviada de su trayectoria por el campo eléctrico de un núcleo atómico. La intensidad de esta radiación se incrementa para partículas de masa pequeña, como los electrones. Asimismo, esta también depende del número

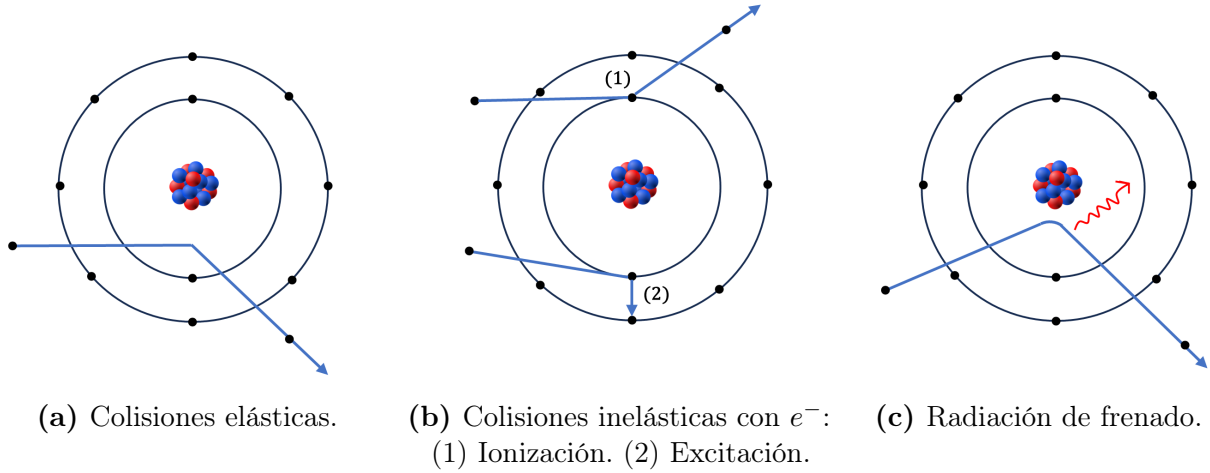


Figura 1: Mecanismos de interacción de los electrones con la materia.

atómico del material con el que interacciona, teniéndose una mayor probabilidad de interacción para Z más elevados [7],[9].

Además, en función del rango energético considerado, algunos procesos predominan frente a otros. A bajas energías, por debajo de los 10 MeV, prevalece la ionización por las colisiones inelásticas con los electrones del medio. Mientras que a altas, por encima de los 10 MeV, la radiación de *bremsstrahlung*.

Para describir la pérdida de energía aproximadamente continua de los electrones al atravesar un medio, se emplea el *poder de frenado másico*. Esta magnitud se define, en unidades de $\text{J m}^2 \text{kg}^{-1}$, como la pérdida media de energía dE de las partículas cargadas al atravesar una longitud de camino dl en un material de densidad ρ ,

$$\frac{S}{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{dl}; \quad (1.2)$$

donde a la cantidad $S = dE/dl$ se le denomina poder de frenado lineal. Normalmente, el poder de frenado másico se expresa como la suma de distintas contribuciones independientes,

$$\frac{S}{\rho} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dl} \right)_{\text{el}} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dl} \right)_{\text{rad}} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dl} \right)_{\text{nuc}}. \quad (1.3)$$

La primera componente se denomina poder de frenado másico electrónico y da cuenta de la pérdida media de energía por unidad de longitud de camino debido a las colisiones inelásticas con los electrones del medio, que resultan en la ionización y excitación del mismo. El segundo término es el poder de frenado másico radiativo por las emisiones *bremsstrahlung*. Mientras que el tercero, se refiere al poder de frenado másico nuclear por

las colisiones elásticas en las que se imparte energía de retroceso a los átomos del material. Este último es despreciable en el caso de partículas cargadas ligeras, como los electrones [12].

Las trayectorias de los electrones son sinuosas, es decir, poco rectilíneas. Esto implica que su alcance, definido como el recorrido total de la partícula supuesto este rectilíneo, sea muy inferior a la longitud de la trayectoria realmente descrita [11]. Se define el alcance CSDA (del inglés *Continuous Slowing Down Approximation*) como la longitud de camino promedio recorrida por una partícula cargada hasta alcanzar el reposo bajo la *Continuous Slowing Down Approximation*. En dicha estimación, la tasa de pérdida de energía en cada punto de la trayectoria se considera equivalente al poder de frenado total y se desprecian las pérdidas de energía por fluctuaciones. Matemáticamente, el alcance CSDA se obtiene integrando el inverso del poder de frenado másico total respecto a la energía [13], es decir,

$$r_0 = \int_0^{E_0} \frac{\rho}{S(E)} dE. \quad (1.4)$$

1.4. El método Monte Carlo

La denominación “Monte Carlo” fue escogida en los años 40, por los científicos Stanislaw Ulam y John von Neumann, que trabajaban en el proyecto de armas nucleares en Los Álamos, para designar métodos numéricos basados en el empleo de números aleatorios. Por tanto, el nombre hace referencia al casino de Montecarlo, la capital del juego al azar. Actualmente, este método se utiliza para resolver problemas físicos y matemáticos complejos. Tiene numerosas aplicaciones en mecánica estadística, empleándose en estudios de estructura molecular; en astrofísica, para el modelado de la evolución de galaxias; en meteorología, utilizándose en la estimación de las predicciones; y por supuesto en el ámbito que es de interés en este trabajo, el transporte de radiación a través de la materia [14], [3].

El método Monte Carlo es una forma de resolver un problema determinista mediante una aproximación estocástica utilizando números y variables aleatorias. Su principal objetivo es calcular el valor de una magnitud con una cierta incertidumbre, siendo la estructura básica del mismo la siguiente [15]:

- Un número aleatorio es generado por muestreo numérico de la PDF (del inglés

Probability Density Function) de una determinada magnitud ξ .

- Se repite este procedimiento n veces, de manera que los resultados sean estadísticamente independientes,

$$\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \quad \bar{\xi}_1 = \bar{\xi}_2 = \dots = \bar{\xi}_n := m, \quad \Delta\xi_1 = \Delta\xi_2 = \dots = \Delta\xi_n := \sigma. \quad (1.5)$$

Definiéndose además sus sumas, se tiene

$$\rho_n = \sum_{i=1}^n \xi_i, \quad \bar{\rho}_n = \sum_{i=1}^n \bar{\xi}_i = nm, \quad \Delta\rho_n = \sqrt{n}\sigma. \quad (1.6)$$

- El valor de la magnitud de interés se considera el promedio de las distintas observaciones,

$$\bar{\xi} = \frac{\rho_n}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n \xi_i}{n}. \quad (1.7)$$

Aplicando el Teorema Central del Límite, se cumple que para una toma de medidas lo suficientemente grande ($n \rightarrow \infty$), la PDF asociada a $\bar{\xi}$ es una distribución gaussiana de media m y de desviación estándar ζ/\sqrt{n} ; considerándose esta la incertidumbre de la variable aleatoria y ζ una constante típica del experimento realizado .

En una secuencia completamente aleatoria, cualquier número es imposible de predecir, incluso si se conocen todos los anteriores a este. Sin embargo, los ordenadores generan secuencias pseudoaleatorias, donde los números son producidos por un algoritmo determinista y no muestran ningún patrón aparente desde un punto de vista estadístico. Estos algoritmos utilizan una semilla como punto inicial de cualquier secuencia. De manera que, todas aquellas secuencias que comiencen con la misma semilla serán exactamente iguales, necesitándose distintas para la obtención de diferentes resultados [16].

Dado que los algoritmos de muestreo numérico se basan en el uso de números aleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo $[0, 1)$, suelen emplearse diversas técnicas para generar valores aleatorios de una variable x definida en (x_{\min}, x_{\max}) con una determinada PDF. Destacan el método de la transformada inversa y el método de aceptación y rechazo [14].

1.4.1. Simulación Monte Carlo del transporte de radiación

Las mejoras en potencia computacional de las últimas décadas y la disponibilidad de códigos cada vez más sofisticados, ha fomentado el empleo de técnicas Monte Carlo en la simulación del transporte de radiación a través de la materia [17]. Entre sus ventajas, destacan fundamentalmente la reproducción de determinados experimentos, el estudio de escenarios potenciales y la posibilidad de modelar geometrías muy complejas, pudiéndose realizar la optimización del montaje previamente y evitar costes de construcción. Además, permite obtener observables complicados, e incluso imposibles, de medir experimentalmente. Por ejemplo, la deposición de energía por partículas cargadas a escala microscópica. En cambio, cuenta con algunos inconvenientes como el efecto de las incertidumbres estadísticas en los resultados finales y el necesitar tiempos largos de simulación en algunas ocasiones [3].

La simulación Monte Carlo se considera una herramienta muy útil en el ámbito de la física médica, especialmente en radioterapia. Utilizándose en la planificación de tratamientos mediante cálculos dosimétricos, o incluso microdosimétricos, en el diseño de las áreas destinadas a este tipo de terapias garantizándose la seguridad de los trabajadores y en el modelado de cualquier tipo de radiación [15].

De manera genérica, en este tipo de simulación la historia de una partícula se considera una secuencia aleatoria de desplazamientos libres que terminan con un evento de interacción, donde esta modifica su dirección de movimiento, pierde energía y en ocasiones, produce partículas secundarias. La simulación de un experimento consiste en la generación numérica de historias aleatorias. Para ello, se necesita un modelo de interacción, descrito por DCSs (del inglés *Differential Cross Sections*) para los distintos mecanismos. Estas miden la probabilidad de que un proyectil se disperse un cierto ángulo sólido al incidir sobre un blanco y determinan las PDFs de las variables aleatorias que caracterizan una historia, que son:

- El camino libre entre dos eventos de interacción sucesivos.
- El tipo de interacción que tiene lugar.
- La pérdida de energía y la desviación angular de la partícula tras dicha interacción $\Omega = (\theta, \phi)$, siempre y cuando no haya sido absorbida. Además del estado inicial de

las partículas secundarias, si se generan.

Una vez conocidas las PDFs, se puede generar un número lo suficientemente grande de historias aleatorias, como para obtener información cuantitativa del transporte de radiación promediando los resultados sumados [14].

Los códigos Monte Carlo actuales de transporte de partículas cargadas presentan su base en el algoritmo de historias condensadas, desarrollado fundamentalmente por Berger en 1963 para describir el transporte de electrones a energías por encima de los 10 keV [17]. A lo largo de los años, diversos modelos han sido creados por distintos desarrolladores de códigos. Destacan ETRAN, primer código Monte Carlo para la simulación de electrones y fotones en geometrías sencillas; EGSnrc, una versión actualizada del software EGS con fines clínicos, donde se consideran únicamente interacciones electromagnéticas; FLUKA, código de propósito general que reproduce la propagación en la materia de hasta 60 partículas distintas [18]; GEANT4 y PENELOPE, ambos serán descritos en detalle en la sección 1.5.

El compromiso entre precisión y rapidez de las simulaciones continúa considerándose la principal motivación en el desarrollo de nuevos códigos Monte Carlo, siendo imprescindible corroborar que proporcionen resultados consistentes. Dado que las validaciones experimentales presentan diversas dificultades, se utiliza habitualmente la estimación *Dose Point Kernels* (DPK) para electrones y positrones. En el presente trabajo se emplea este método para la verificación de PENG4, optimizando los parámetros de transporte del código PENELOPE como se verá en la sección 2.1.2, comparando con otras simulaciones realizadas mediante GEANT4 y tomando de referencia los datos de EGSnrc en agua.

1.5. Códigos Monte Carlo empleados

1.5.1. GEANT4

GEANT4 consiste en un conjunto de herramientas de libre distribución para la simulación de la interacción radiación materia mediante métodos Monte Carlo. Inicialmente se creó para dar soporte a experimentos de la física de altas energías. Sin embargo, gracias a nuevas implementaciones y extensiones del código, su rango de aplicación se ha extendido, utilizándose también en el área de la física médica, aceleradores, diseño de detectores y protección de radiación [19].

El código está escrito en C++ y presenta una amplia flexibilidad, permitiendo que cualquier usuario desarrolle su propio experimento y adquiera la información deseada del mismo. Destaca su capacidad MT (del inglés *Multi-Threading*), es decir, de subprocesamiento múltiple. Admite la ejecución de simulaciones paralelas, aumentando el rendimiento del procesador. Además, posibilita la recreación de configuraciones experimentales y formas geométricas extremadamente complejas [20].

Su núcleo cuenta con 17 categorías relacionadas entre sí, que incluyen todos los posibles elementos involucrados en una simulación. Además, algunas de ellas reciben el nombre de conceptos relevantes para comprender claramente este trabajo. Se van a describir brevemente las categorías más importantes, mientras que las clases de obligada implementación por el usuario se explican y particularizan al ejemplo trabajado en la sección 2.1.

- *Global*: se definen las constantes físicas, el sistema de unidades y los generadores de números aleatorios.
- *Material y Particles* (Material y Partículas): se incluyen las clases que permiten describir tanto las propiedades físicas de las partículas como de los materiales de la base de datos.
- *Geometry* (Geometría): se tienen las clases que permiten modelar la geometría de la simulación considerada.
- *Track* (Pista): contiene tanto la información de una partícula en un instante dado en la clase `G4Track` como la actualización de la misma tras cada *step* en `G4TrackingManager`. Se denomina *step* al cambio producido en el estado de una partícula entre un punto y otro de su trayectoria. Se representa mediante `G4Step` y se gestiona en `G4SteppingManager`.
- *Processes* (Procesos): se incluyen los modelos disponibles para recrear las interacciones entre partículas. El estudio de distintas listas de físicas facilitadas por GEANT4 se presenta en la sección 3.1.
- *Tracking* (Seguimiento): se controla la información respectiva a la evolución del estado de una partícula durante su transporte.
- *Digits+Hits* (Impacto y Respuesta): se define la respuesta de los volúmenes sensibles a partir de la información de *tracking*.

- *Event* (Evento): se describen los procesos dados a partir de una situación inicial definida por el generador de partículas primarias mediante las clases `G4Event` y `G4EventManager`. El concepto *event* es la unidad básica de simulación en GEANT4, siendo equivalente a *history* en el algoritmo genérico de simulaciones Monte Carlo.
- *Run* (Ejecución): se encarga de controlar la información de una sucesión de eventos que comparten la misma geometría, generador de partículas primarias y lista de física, en las clases `G4Run` y `G4RunManager`.

Por su parte, las categorías *visualization* (visualización), *persistency* (persistencia), *interfaces* (entornos) y *readout* (lectura de salida) constituyen la interfaz de comunicación exterior de GEANT4 [3].

1.5.2. PENG4

PENELOPE (del inglés *Penetration and ENERgy LOss of Positrons and Electrons*) se trata de un código de propósito general y libre distribución que describe mediante simulación Monte Carlo el transporte acoplado de electrones y fotones en un amplio rango de energías, desde 50 eV hasta 1 GeV. Implementa los modelos de interacción más precisos disponibles actualmente, utilizando un elaborado algoritmo de historias condensadas clase II para electrones y positrones. Además, presenta herramientas eficientes para rastrear partículas a través de geometrías complejas y otros complementos, como la simulación de electrones y positrones bajo la influencia de un campo magnético y la dispersión de haces de fotones polarizados [21].

Se considera uno de los códigos más robustos, debido a las exitosas comparaciones con otros de referencia y medidas tomadas directamente de la literatura [22]. No obstante, está escrito principalmente en Fortran 77, con algunas extensiones en Fortran 90. A pesar de considerarse un lenguaje de programación de alto nivel, no permite ejecutar simulaciones paralelas y resulta complicado enlazar sus subrutinas con otros códigos de simulación [23].

Dado que las características de PENELOPE son únicas y GEANT4 presenta capacidades MT, además de herramientas estadísticas y opciones de geometría avanzada, surgió la motivación de traducir PENELOPE-2018 en C++ para implementarse como una extensión en GEANT4. Es decir, nació la idea y desarrollo de PENG4.

Modelos de interacción

PENG4 permite ejecutar tanto un modo PENELOPE puro como uno híbrido con GEANT4. Los parámetros que definen estos umbrales son E_{THR} y E_{MAX} . Aquellas partículas con una energía inferior a E_{THR} , se convierten en partículas “PENELOPE”. En el caso de electrones pasan de una partícula “Geant4” (“ e ”) a una partícula “PENELOPE” (“ pe^- ”), en la clase `PenPartConvertProcess`. Estas se simulan con la física de PENELOPE implementada en `PenEMProcess`. En cambio, E_{MAX} se corresponde con el valor máximo que permite construir sus tablas de física. Entre E_{THR} y E_{MAX} , se utiliza la física regular de GEANT4, aunque la de PENELOPE siga accesible. Mientras que por encima de E_{MAX} solo está disponible y se emplea GEANT4 [21].

En PENELOPE se describen las interacciones que sufren las partículas al atravesar un medio, que se presupone amorfo, homogéneo e isótropo, mediante las DCSs. Supongamos un proceso cualquiera, en el que un proyectil con energía E se mueve en la dirección $\mathbf{d} = (0, 0, 1)$ al incidir sobre un blanco. Tras la colisión, el proyectil emerge en una nueva dirección \mathbf{d}' , que resulta conveniente definir en función de los ángulos de dispersión polar θ y acimutal ϕ , con una energía $E' = E - W$, donde W se refiere a la energía transferida en la interacción. De esta forma, se define cada proceso (int) con su DCS, dependiente de la energía E , por unidad de energía transferida dW y unidad de ángulo sólido $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$,

$$\frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dW d\Omega} = \sigma_{\text{int}}(E) \rho_{\text{int}}(E; W, \theta, \phi). \quad (1.8)$$

Siendo σ_{int} la sección eficaz total del proceso,

$$\sigma_{\text{int}} = \int_0^{E_0} dW \int d\Omega \frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dW d\Omega}. \quad (1.9)$$

Además, $\rho_{\text{int}}(E; W, \theta, \phi)$ es la función densidad de probabilidad conjunta normalizada, de la energía transferida W y los respectivos ángulos de dispersión. Normalmente las DCSs son independientes del ángulo acimutal debido a la isotropía supuesta del medio material. Realizando el siguiente cambio de variables,

$$\mu = \frac{1 - \cos\theta}{2} \implies d\mu = \frac{\sin\theta d\theta}{2}, \quad 0 (\theta = 0) \leq \mu \leq 1 (\theta = \pi), \quad (1.10)$$

para expresar el elemento de ángulo sólido $d\Omega = 2d\mu d\phi$, se puede definir la DCS por unidad de energía transferida dW y unidad de desviación $d\mu$ en dispersiones axialmente

simétricas, donde ϕ está uniformemente distribuida entre $[0, 2\pi)$,

$$\frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dWd\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{2dWd\mu d\phi} \implies \frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dWd\mu} = 2 \int_0^{2\pi} d\phi \frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dWd\Omega} = 4\pi \frac{d\sigma_{\text{int}}(E)}{dWd\Omega}. \quad (1.11)$$

El camino libre medio entre interacciones, es decir, la distancia promedio que la partícula recorre a través del material sin experimentar una interacción, se expresa en función de la sección eficaz total del proceso correspondiente,

$$\lambda_{\text{int}}(E) = \frac{1}{\mathcal{N}\sigma_{\text{int}}(E)}. \quad (1.12)$$

Siendo el camino libre inverso $\lambda_{\text{int}}^{-1}$ la probabilidad de interacción por unidad de longitud de la trayectoria del proyectil y \mathcal{N} el número de moléculas por unidad de volumen. Este último en función del número de Avogadro N_A (g/cm³), la masa molar A_m (g/mol) del material y su densidad ρ viene dado por,

$$\mathcal{N} = \frac{N_A \rho}{A_m}. \quad (1.13)$$

Los modelos físicos combinan resultados de cálculos de primeros principios o *ab initio*, de fórmulas semiempíricas y de bases de datos evaluadas. De esta forma, la DCS de cada proceso de interacción es definida numéricamente, o mediante una expresión analítica con parámetros ajustados atendiendo a información experimental o teórica [23].

Cabe mencionar los modelos empleados para describir las interacciones entre electrones. En las colisiones elásticas, el método *Dirac partial-wave expansion* y para energías por encima de los 100 MeV el modelo *Wentzel* [24]. En las colisiones inelásticas, la aproximación de *Born*, con el modelo *Stern-heimer-Liljequist GOS* y emitiendo los electrones secundarios en la dirección de transferencia de momento [25]. En las emisiones *bremsstrahlung*, las DCSs correspondientes a la energía de los fotones de *Seltzer y Berger* [26]. Mientras que las distribuciones angulares se ajustan a los datos *partial-wave* de *Kissel* [27]. En las ionizaciones de las capas más cercanas, las secciones eficaces totales de las capas K, L y M utilizando la *distorted-wave Born approximation* [28] y la desexcitación atómica mediante la *Evaluated Atomic Data Library* (EADL) [21], [23].

Algoritmo de historias condensadas clase II

PENG4 emplea un algoritmo de historias condensadas clase II para simular electrones

y positrones, caracterizado por unos parámetros controlados por el usuario.

Dado que las DCSs para interacciones de alta energía entre partículas cargadas son funciones rápidamente decrecientes de la pérdida de energía W y el ángulo polar de dispersión θ , se pueden establecer unos umbrales W_c y θ_c . De manera que, el número de eventos intensos que ocurren en cada historia de una partícula; es decir, de interacciones con pérdidas de energía o ángulo de dispersión polar superior a los límites correspondientes, es suficientemente pequeño como para permitir su simulación individual mediante muestreo aleatorio de sus DCSs restringidas. En cambio, la deflexión angular acumulada y la pérdida de energía debido a las interacciones suaves que ocurren a lo largo de un *step* entre dos eventos intensos, se puede describir mediante una aproximación de dispersiones múltiples.

Las trayectorias de las partículas se generan utilizando el método *random-hinge*, donde la partícula transportada se mueve en 'saltos' rectos. De esta forma, la energía y dirección de movimiento solo se modifican mediante eventos discretos, interacciones intensas utilizando simulación detallada y *hinges* como aproximación para las suaves [23].

De esta forma, los algoritmos clase II o mixta permiten realizar simulaciones más precisas que los clase I. Posibilitando además verificar su estabilidad ante variaciones de los parámetros, como se muestra en la sección 2.1. A continuación, se describen el origen y significado de los distintos parámetros característicos de PENG4, según las interacciones consideradas.

Interacciones con pérdidas de energía

Las interacciones con pérdidas de energía se controlan mediante los umbrales W_{CC} , para colisiones inelásticas; y W_{CR} , para emisiones bremsstrahlung. Ambos en unidades de eV e independientes de la energía del proyectil. Aquellas que tengan una pérdida de energía W superior a los límites impuestos, se consideran eventos intensos y se simulan individualmente mediante muestreo aleatorio de las DCSs correspondientes. Mientras que la desaceleración por eventos suaves es descrita con el poder de frenado restringido,

$$S_S(E) = \int_0^{W_{CC}} W \left(\int_0^1 \frac{d\sigma_{in}(E)}{dW d\mu} d\mu \right) dW + \int_0^{W_{CR}} W \frac{d\sigma_{br}(E)}{dW} dW. \quad (1.14)$$

Dado que la energía de una partícula decrece a lo largo de un *step* entre dos eventos intensos, y los umbrales W_{CC} y W_{CR} adquieren un valor fijo, se asume que la dependencia de las DCSs para eventos suaves es lineal con la energía. Bajo esta aproximación, se calculan los primeros momentos de la distribución de pérdida de energía W_s de una partícula con E_0 tras una longitud de camino s . En la práctica, se utiliza una distribución artificial $P(W_s)$, con la misma media y varianza que W_s , para la estimación de la pérdida de energía debida a eventos suaves, siendo necesario un número moderadamente largo de steps para que $P(W_s)$ tenga los mismos primeros momentos que W_s y una forma similar [23].

Colisiones elásticas

Las deflexiones angulares de las trayectorias de los electrones son debidas fundamentalmente a colisiones elásticas con los núcleos atómicos del material. Para analizar el efecto acumulativo de múltiples interacciones, se considera un electrón que parte del origen en la dirección z y con energía E_0 . Siendo θ_m el ángulo polar de la dirección de movimiento y (x, y, z) la posición tras una longitud s . Suponiendo pérdidas de energía despreciables, las teorías de dispersiones múltiples de *Goudsmit y Saunderson*, y *Lewis* proporcionan expresiones exactas para la distribución angular, $p(\mu_m)$ con $\mu_m = (1 - \theta_m)/2$ y los valores promedios $\langle \cos \theta_m \rangle$, $\langle \cos^2 \theta_m \rangle$, $\langle z \rangle$, $\langle z \cos \theta_m \rangle$, $\langle z^2 \rangle$ y $\langle x^2 + y^2 \rangle$. Estas puede determinarse mediante el camino libre medio entre colisiones elásticas λ_{el} .

En PENELOPE, la deflexión de corte μ_c , que separa dispersiones elásticas intensas y suaves, varía con la energía, garantizándose una simulación detallada a bajas, donde estos procesos son más intensos y los ángulos de deflexión mayores. Este umbral se determina mediante dos parámetros adimensionales, C_1 y C_2 , que son controlados por el usuario y fijan el camino libre medio entre colisiones elásticas intensas,

$$\lambda_{el}^{(h)}(E) = \max \left\{ \lambda_{el}(E), \min \left[C_1 \lambda_{el,1}(E), C_2 \frac{E}{S(E)} \right] \right\}, \quad (1.15)$$

donde $\lambda_{el,1}$ es el primer término del camino libre medio y S el poder de frenado por colisiones inelásticas y emisiones *bremssstrahlung*. De manera que mediante la expresión,

$$\lambda_{el}^{(h)}(E) = \left[\mathcal{N} \int_{\mu_c}^1 \frac{d\sigma_{el}(E)}{d\mu} d\mu \right]^{-1} \quad (1.16)$$

se fija el umbral μ_c en función de la energía del proyectil.

La deflexión angular promedio de la trayectoria del electrón al final de un *step* de longitud $\lambda_{\text{el}}^{(h)}$, puede evaluarse mediante la teoría de *Lewis*,

$$1 - \langle \cos \theta_m \rangle = 1 - \exp \left\{ -\frac{\lambda_{\text{el}}^{(h)}}{\lambda_{\text{el},1}} \right\} \approx \frac{\lambda_{\text{el}}^{(h)}}{\lambda_{\text{el},1}} \leq C_1. \quad (1.17)$$

Es decir, C_1 define un límite superior aproximado para la deflexión angular acumulativa promedio por *step*.

Asimismo, la pérdida de energía promedio por *step* se expresa,

$$\langle E - E_{\text{final}} \rangle \approx \lambda_{\text{el}}^{(h)} S \leq C_2 E. \quad (1.18)$$

Luego C_2 establece un límite a la pérdida de energía fraccional promedio por *step*.

Un incremento de estos parámetros conlleva un aumento del camino libre medio entre eventos intensos $\lambda_{\text{el}}^{(h)}$ y de la deflexión de corte μ_c . Lo que implica además una reducción del número de interacciones intensas en la trayectoria de una partícula; y por ende, del tiempo de simulación. Además, C_1 y C_2 actúan sobre dominios energéticos distintos, como es posible deducir de la ecuación 1.15. Para energías bajas, $\lambda_{\text{el}}^{(h)} = \lambda_{\text{el}}$ y la simulación es totalmente detallada ($\mu_c = 0$). Para energías intermedias, $\lambda_{\text{el}}^{(h)} = C_1 \lambda_{\text{el},1}$. Mientras que para altas, $\lambda_{\text{el}}^{(h)} = C_2 E/S$.

Al igual que ocurría con W_{CC} y W_{CR} , existe una distribución angular para describir colisiones elásticas suaves a lo largo de una longitud de camino s . En PENG4, la deflexión angular μ_s tras una longitud de camino s se obtiene mediante muestreo de una distribución $P(\mu_s)$ más simple, que posee los mismos primeros y segundos momentos que la original [23].

El método *Random-Hinge*

La deflexión angular acumulada θ_m por las interacciones suaves que ocurren durante un *step*, se simula como si fuera causada por un único evento (un *hinge*), que tiene lugar en una posición arbitraria del mismo. La pérdida de energía W_s y la deflexión angular μ_s se obtienen por muestreo numérico de distribuciones artificiales, que preservan determinadas características de la original, tal y como se ha comentado anteriormente.

Suponiendo que las pérdidas de energía por colisiones suaves son pequeñas, la distancia

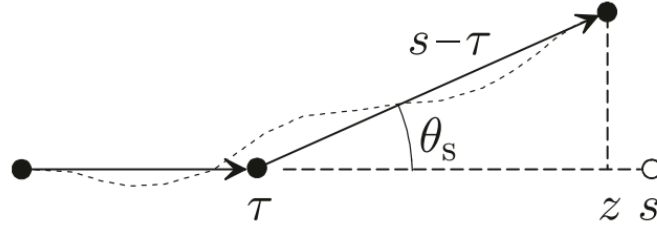


Figura 2: Ilustración del método *Random-Hinge* [23].

s recorrida por un e^- con energía E_0 desde su posición actual hasta el siguiente evento intenso se puede muestrear aleatoriamente mediante una distribución exponencial,

$$s = -\lambda_T^{(h)}(E) \ln \xi, \quad (1.19)$$

donde ξ es un número aleatorio distribuido en $(0, 1)$ y $\lambda_T^{(h)}$ el camino libre medio total

$$\frac{1}{\lambda_T^{(h)}(E)} = \frac{1}{\lambda_{el}^{(h)}(E)} + \frac{1}{\lambda_{in}^{(h)}(E)} + \frac{1}{\lambda_{br}^{(h)}(E)}. \quad (1.20)$$

$\lambda_{el}^{(h)}$ se refiere al camino libre medio entre colisiones elásticas intensas, $\lambda_{in}^{(h)}$ entre colisiones inelásticas y $\lambda_{br}^{(h)}$ entre emisiones *bremsstrahlung*. De esta forma, la deflexión angular y desplazamiento espacial por múltiples interacciones suaves a lo largo de un *step* de longitud s se describe mediante este método, ilustrado esquemáticamente en la figura 2, que opera de la siguiente forma:

- Se muestrea la longitud s del *step* hasta el siguiente evento intenso mediante la función 1.19.
- Se muestrea la pérdida de energía por eventos suaves W_s .
- Se mueve el electrón una distancia aleatoria $\tau = \xi s$.
- Se muestrea la deflexión angular μ_s por colisiones elásticas e inelásticas suaves y se cambia la dirección de movimiento.
- Se mueve el electrón una distancia $s - \tau$ en la nueva dirección, siendo la energía al final del *step* $E - W_s$ [23].

Además, PENELOPE también cuenta con un parámetro adicional, s_{max} , que limita la longitud máxima de *step* entre eventos intensos. No obstante, su uso no se consideró dentro de los objetivos de este trabajo.

2. Metodología

En este capítulo, se describe en detalle el procedimiento llevado a cabo para cumplir los objetivos de este trabajo: simulación del transporte de electrones a través de un medio material mediante GEANT4 y PENG4, para la posterior verificación de este último utilizando *Dose Point Kernels* (DPK).

2.1. Simulaciones

Para realizar las simulaciones, se ha trabajado con uno de los ejemplos extendidos de GEANT4, `TestEm12` [29], el cual permite trazar un perfil de dosis en profundidad en geometría esférica y está disponible en el repositorio oficial de GEANT4 [19]. En primer lugar, se ha empleado directamente la macro `berger.mac`, con la finalidad de aprender a utilizarlo y analizar distintas listas de física disponibles. Una vez se estuvo familiarizado con el código, se adaptó la misma a PENG4, utilizándose en este caso la macro `berger-PenG4.mac`, disponible en el anexo A.

Para utilizar GEANT4, se tuvo que instalar la máquina virtual *Oracle VM Virtual Box* en el portátil, donde se lanzaron simulaciones preliminares. No obstante, las definitivas se realizaron en el cluster FIS-ATOM.

En todas las simulaciones, se lanzaron 10^6 eventos y el modelo consiste en una fuente puntual de electrones situada en el centro de una esfera de 3 cm de radio, compuesta por un material determinado, que se fija mediante el archivo de entrada o macro. Se utilizó en un principio agua para la verificación y comparación de códigos, ampliándose posteriormente a otro material de interés clínico, hueso.

En agua, la esfera fue dividida en 120 capas, midiéndose la energía depositada en cada una de ellas hasta un radio de $1.2r_0$ normalizado a la densidad del material, como se ilustra en la figura 3. r_0 se corresponde con el alcance CSDA, una aproximación del promedio de longitud de camino recorrido por una partícula cargada hasta finalmente llegar al reposo [13], como se explicó en la sección 1.3. En cambio, la esfera fue dividida en 150 capas en hueso para mantener consistencia con el código empleado para la comparación [30], midiéndose la energía depositadas en cada una de ellas hasta un radio de $1.5r_0$. Estos parámetros asociados a la geometría, construida en la clase de GEANT4 `DetectorConstruction`, pueden ser modificados en el archivo de entrada mediante los

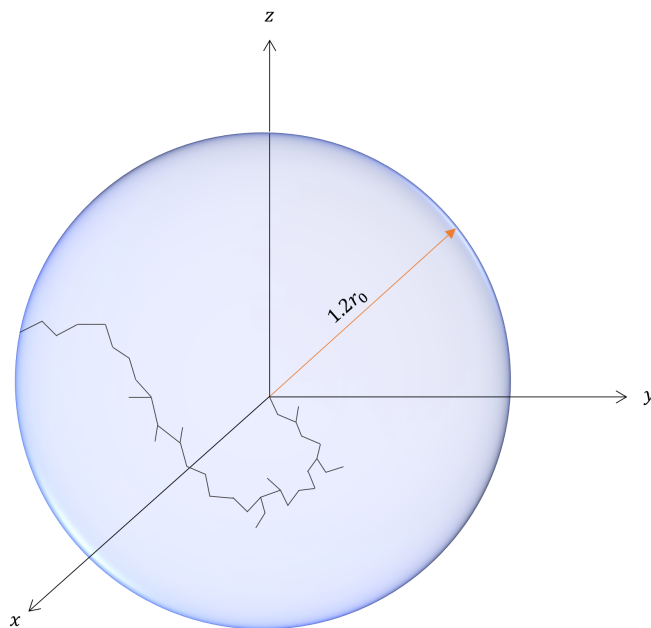


Figura 3: Modelo esférico de las simulaciones en agua, mostrándose esquemáticamente la traza de un e^- primario lanzado desde el origen.

comandos de la clase `DetectorMessenger`.

En cuanto a la física utilizada, se cuenta con múltiples listas en GEANT4 además de la específica del código PENELOPE, explicada en detalle en la sección 1.5.2, en PENG4. Teniendo en cuenta que las partículas lanzadas son electrones y el rango de energías de trabajo, de 10 keV a 1000 keV, la energía depositada en el material se debe fundamentalmente a la interacción coulombiana entre electrones, que provocan la ionización y excitación del mismo; y a procesos de *bremstrahlung*. La energía depositada por los posibles fotones emitidos como consecuencia de estos fenómenos, no es significativa en comparación con la de los propios electrones, ya sean primarios o secundarios. Esto se debe a que muchos de los fotones escapan del propio material. Por ende, cuando se describan en detalle las listas de física empleadas en GEANT4, se presta especial atención a la interacción de los electrones con la materia.

La estimación de *Dose Point Kernels* (DPK) se utiliza para verificar la precisión y exactitud de distintos códigos Monte Carlo que simulan partículas cargadas ligeras. Su expresión matemática depende del tipo de radiación y las características del medio. Considerando nuestro modelo simplificado, en el que una fuente monoenergética de electrones

emite con una energía E_0 en un medio homogéneo e isotrópico en el origen de coordenadas, y la aproximación CSDA para el poder de frenado $S(E)$; se tiene según Berger (1971) la siguiente expresión analítica para la magnitud adimensional DPK [31] [32],

$$DPK(r/r_0, E_0) = 4\pi r^2 \rho r_0 \Phi(r, E_0), \quad \text{con} \quad \Phi(r, E_0) = \frac{D(r)}{4\pi r^2 \rho E_0}. \quad (2.1)$$

Donde $\Phi(r, E_0)$ es la fracción específica absorbida en una geometría esférica a una distancia radial r en un material de densidad ρ . Teniendo en cuenta que $D(r)$ se conoce dosis absorbida, y representa la fracción $dE(r)$ de E_0 absorbida en una capa esférica de espesor dr a una distancia r , se obtiene una expresión para el observable de interés directamente aplicable en la determinación Monte Carlo [33],

$$DPK(r/r_0, E_0) = \frac{d(E/E_0)}{d(r/r_0)}. \quad (2.2)$$

Este ejemplo `TestEm12` tiene predefinidos varios histogramas unidimensionales, que pueden obtenerse de la energía depositada a lo largo de la trayectoria de la partícula incidente. El histograma `h8` proporciona el perfil de energía normalizado $d(E/E_0)/d(r/r_0)$ [29]. Por tanto, representando esta magnitud frente al radio normalizado r/r_0 se tienen las curvas DPK , en las que se basa mi análisis y comparación de códigos en este trabajo. Cabe destacar que el valor de r_0 es calculado en cada simulación, en unidades de longitud, en la clase `G4EmCalculator` de GEANT4.

Para iniciar una simulación, se debe compilar en una carpeta que se denominó *build*, para posteriormente ejecutarla en la terminal. Al finalizarse, GEANT4 proporciona varios ficheros. Uno es el *output* de la misma, que especifica los parámetros, física utilizada y algunos resultados obtenidos, como el alcance CSDA. Además, se facilitan los datos del histograma seleccionado mediante un fichero `'csv'`. Se puede modificar el formato del mismo en `HistoManager.cc` [29].

Para la visualización y representación de resultados se ha empleado `Matlab`, creándose un *script* genérico e importándose los datos obtenidos en las simulaciones en cada caso.

2.1.1. GEANT4

En GEANT4 se trabajó directamente con el ejemplo `TestEm12` [29], concretamente con la macro `berger.mac`. Para realizar una simulación, el usuario debe definir en la propio

macro los parámetros del modelo geométrico, la física utilizada, cómo comienza un evento y la información que se va extraer de la misma, en nuestro caso el observable DPK.

En cuanto a los aspectos geométricos, se definió el radio de la esfera y se utilizó `G4_WATER` para agua con una densidad de 1 g/cm^3 y `G4_BONE_COMPACT_ICRU` para hueso con una densidad de 1.85 g/cm^3 . En cada evento, una partícula primaria de GEANT4 se genera en el centro de la esfera, siendo el tipo y su energía establecidos en la clase `PrimaryGeneratorAction`. De acuerdo con la información disponible del test de Berger, en este trabajo se han lanzado electrones monoenergéticos con energía cinética inicial variada: 10 keV, 15 keV, 100 keV y 1000 keV.

Además, en este ejemplo se facilitan cuatro módulos de listas de física. Se trabajó con `EM physics`, que incluye distintos modelos para describir la interacción electromagnética entre partículas cargadas, en nuestro caso electrones. Entre todas las opciones, se compararon concretamente [19]:

- `emstandard_opt4`

Es la lista estándar de física electromagnética más precisa de GEANT4. Cuenta además con opciones a bajas energías y está construida por `G4EmStandardPhysics_option4`. Para electrones, las dispersiones múltiples de coulomb utilizan el modelo *Goudsmit-Sounderson* en un rango energético desde 0 hasta 100 MeV, combinándose con el modelo de dispersión única para mayores ángulos de deflexión. La interacción de *bremsstrahlung* se implementa mediante la aproximación *Seltzer-Berger* para energías por debajo de 1 GeV, mientras que la ionización se lleva a cabo con el modelo *Livermore* y la producción de pares electrón-positrón emplea el modelo BetheHeitler por debajo de los 20 MeV. Por otro lado, se tiene también el modelo *Livermore* para dispersión compton, efecto fotoeléctrico y dispersión rayleigh, para energías inferiores a 1 GeV.

- `emlivermore`

Esta lista de física electromagnética utiliza la base de datos y modelos *Livermore* a bajas energías, estando construida por `G4EmLivermorePhysics`. Fue desarrollada tras `emstandard_opt3`, sustituyendo sus modelos estándar para la radiación gamma y electrones por el de *Livermore*. Dado que `emstandard_opt4` es posterior a esta,

incluye sus mejoras a bajas energías. Es decir, con el tipo de partícula y rango de energías trabajado, los modelos de esta lista coinciden con los implementados en `emstandard_opt4`.

- `empenelope`

Es la lista de física electromagnética que implementa los modelos de PENELOPE para energías por debajo de 1 GeV, y está contruida por `G4EmPenelopePhysics`. Para dispersiones múltiples de coulomb utiliza también el modelo *Goudmit-Sounderson* en un rango energético desde 0 hasta 100 MeV. Sin embargo, la interacción de *bremssstrahlung* e ionización se llevan a cabo mediante física específica de PENELOPE. Al igual que en la dispersión compton, efecto fotoeléctrico y dispersión rayleigh. Esta lista de física no es análoga a PENG4, ya que no incluye los métodos de transporte de PENELOPE.

Otro parámetro importante de estas simulaciones es el corte de producción, o en inglés *production cut*. Dado que diversos procesos, especialmente la interacción *bremssstrahlung* e ionización, tienen secciones eficaces muy altas a bajas energías, resulta necesario implementar un corte de producción. De esta forma, todas las partículas por debajo de dicho umbral no se generan, aunque su energía contribuye a la deposición de la misma. Cuanto más se incremente el valor de este parámetro, el número de partículas secundarias generadas será menor y por tanto, el tiempo de simulación disminuirá. GEANT4 utiliza los cortes de producción en alcance, es decir, en unidades de longitud, convirtiéndolos internamente en el código en cortes de producción energéticos.

En todas las simulaciones se tomó como corte de producción 2 μm , de manera que, el umbral energético de producción se corresponde con 990 eV, el valor instaurado por defecto en GEANT4. En el transporte de electrones a bajas energías, basta con aplicar este corte de producción a la ionización y *bremssstrahlung*. Sin embargo, es posible ampliarlo a otros procesos si resulta necesario en otras simulaciones.

2.1.2. PENG4

Para implementar el módulo PENG4 en el ejemplo `TestEm12` de GEANT4, se realiza una adaptación de la macro `berger.mac`. El nuevo, denominado `berger-PenG4.mac`, se presenta en el anexo [A](#) e incorpora las siguientes modificaciones en el propio código de

GEANT4:

- Se copian los archivos que contienen la física y algoritmos de PENELOPE, compilando el código resultante.
- Se adapta la lista de física para que GEANT4 trabaje con `PenelopeEMPhysics` y las partículas “PENELOPE” (`PenElectron`, `PenGamma`, `PenPositron`). Para ello, `PenelopeEMPhysics constructor` se convierte en una opción adicional de las ya facilitadas por GEANT4 en la clase `PhysicsList` y las partículas “PENELOPE” se declaran y construyen en `PhysicsList` y `PenelopeEMPhysics`. Además, PENG4 necesita una lista de física electromagnética de GEANT4 como ‘base’, instaurándose en este caso `emstandard_opt4`.
- Se definen E_{MAX} , máxima energía posible de actuación de PENELOPE y E_{THR} , umbral de conversión de las partículas de GEANT4 en partículas “PENELOPE”.
- Se adapta la geometría en la clase `DetectorConstruction` para que por cada material seleccionado de GEANT4, se registre uno equivalente de la base de datos de PENELOPE. Este último debe especificarse en la propia macro con su número identificativo, que puede encontrarse en la lista de materiales de PENELOPE [14]. Además, a cada uno se le define su conjunto de parámetros MSIMPA (C_1 , C_2 , W_{CR} , W_{CC} y E_{ABS}) y a cada volumen su $DSMAX$, que limita la longitud máxima de *step* al igual que `StepMax` en GEANT4, si resulta necesario.

Por tanto, en PENG4 se deben elegir los valores de unos parámetros, que determinan la velocidad y precisión de las simulaciones. Estos se fueron variando en el propio macro `berger-PenG4.mac`.

En primer lugar, deben definirse E_{MAX} y E_{THR} en función de la energía cinética inicial del haz de electrones. En todas las simulaciones, se escogió $E_{MAX}=E_{THR}$ con un valor ligeramente superior a E_0 . De esta forma, las partículas de GEANT4 se convierten inmediatamente en partículas “PENELOPE” al comienzo de la simulación y esta es realizada por PENG4 íntegramente.

Parte de este trabajo consiste en la optimización de las variables características de este código: C_1 , C_2 , W_{CR} , W_{CC} y E_{ABS} . El propio artículo de referencia de PENG4 facilita unos valores razonables para comenzar a estudiar su influencia sobre los resultados obtenidos

[23]. En la tabla 1, se presentan los escogidos en primera instancia.

Se realizaron simulaciones con haces de electrones monoenergéticos en agua, modificando únicamente el valor de uno de los parámetros, mientras el resto permanecía fijo. Así, se analiza exclusivamente el efecto que tiene cada uno; y por tanto, se pueden optimizar de manera adecuada. Además, se comenzaron utilizando electrones con $E_0 = 10$ keV, por corresponderse con el límite inferior de las energías consideradas.

E_{ABS} (eV)	C_1	C_2	W_{CR} (eV)	W_{CC} (eV)
10^2	0.01	0.01	10^2	10^2

Tabla 1: Parámetros iniciales empleados en PENG4.

Para controlar la longitud de *step* entre un par de eventos intensos en un material dado, se tienen C_1 y C_2 , como se explicó en 1.5.2. Concretamente, C_1 limita la deflexión angular promedio por *step* e influye en el tiempo de simulación a energías intermedias; mientras que C_2 limita la pérdida de energía fraccional promedio y afecta al tiempo de simulación a altas energías. Ambos son adimensionales y deben tener un valor pequeño comprendido entre 0 y 0.1. Por ello, para estudiar su efecto sobre las simulaciones, se realizaron varias con los parámetros presentados en la tabla 2 y un haz de electrones con $E_0 = 10$ keV.

E_{ABS} (eV)	C_1	C_2	W_{CR} (eV)	W_{CC} (eV)
10^2	0.00	0.00	10^2	10^2
10^2	0.01	0.01	10^2	10^2
10^2	0.05	0.05	10^2	10^2
10^2	0.10	0.10	10^2	10^2

Tabla 2: Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de C_1 y C_2 , $E_0 = 10$ keV.

Utilizando los valores óptimos para C_1 y C_2 , también se debe examinar la influencia de las energías de absorción E_{ABS} para cada partícula en el material. Teniendo en cuenta las distancias de penetración de los electrones en el mismo. Además, si E_{ABS} supera a las energías cinéticas iniciales de las partículas lanzadas, estas serán directamente absorbidas al comienzo de la simulación. Por tanto, se utilizaron los parámetros presentados en la tabla 3, con un haz de electrones de $E_0 = 10$ keV y considerando que siempre se cumpla $E_{\text{ABS}} < E_0$. Como realmente se pretendía analizar su efecto con respecto a W_{CR} y W_{CC} , se

escogió en este caso $W_{\text{CR}} = W_{\text{CC}} = 10^3$ eV. Para así observar adecuadamente qué ocurre cuando E_{ABS} es superior, inferior o igual a $W_{\text{CR}} = W_{\text{CC}}$.

E_{ABS} (eV)	C_1	C_2	W_{CR} (eV)	W_{CC} (eV)
10^2	0.01	0.01	10^3	10^3
2.5×10^2	0.01	0.01	10^3	10^3
10^3	0.01	0.01	10^3	10^3
2.5×10^3	0.01	0.01	10^3	10^3

Tabla 3: Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de E_{ABS} , $E_0 = 10$ keV.

Por otro lado, para controlar la pérdida de energía por interacción, se tienen los siguientes parámetros, ambos en unidades de eV. W_{CC} se corresponde con el umbral de pérdida de energía en colisiones inelásticas intensas, mientras que W_{CR} con el de eventos *bremsstrahlung* intensos. Ambos influyen en la resolución de la distribución de energía. Para estudiar su efecto sobre los resultados, se tomaron los valores de C_1 , C_2 y E_{ABS} optimizados, teniendo en cuenta que se concluye que $E_{\text{ABS}} = W_{\text{CR}} = W_{\text{CC}}$, como se comentará en la sección 3.2. En este caso, se lanzaron electrones con $E_0 = 1000$ keV, ya que así se puede comparar un mayor rango energético y se estudia también el límite superior de las energías consideradas en este trabajo. En la tabla 4, se presentan los últimos valores empleados para la optimización de PENG4.

E_{ABS} (eV)	C_1	C_2	W_{CR} (eV)	W_{CC} (eV)
10^2	0.01	0.01	10^2	10^2
10^3	0.01	0.01	10^3	10^3
10^4	0.01	0.01	10^4	10^4
10^5	0.01	0.01	10^5	10^5

Tabla 4: Parámetros seleccionados para estudiar la influencia de $W_{\text{CR}} = W_{\text{CC}} = E_{\text{ABS}}$, $E_0 = 1000$ keV.

Se concluye que los parámetros escogidos inicialmente, mostrados en la tabla 1, son además los óptimos y adecuados para las simulaciones con PENG4 en el rango energético considerado. Esto se explicará en detalle en la sección 3.2, correspondiente a la exposición y discusión de resultados con PENG4.

2.2. Metodología para comparar

Para la comparación y análisis de resultados se han abordado distintos procedimientos. Estos se centran tanto en GEANT4 como en PENG4, en la representación gráfica de las curvas DPK obtenidas en las distintas simulaciones frente al radio normalizado r/r_0 .

GEANT4

En GEANT4 se han comparado tres listas de física diferentes: `emstandard_opt4`, `emlivermore` y `empenelope`, utilizando como referencia los datos del código EGSnrc en agua. Dado que no se proporcionaban puntos para ningún otro material, se han tomado en hueso simulaciones realizadas en otros trabajos reconocidos [30]. Estas se han llevado a cabo con FLUKA y PENELOPE, y presentan electrones lanzados con una energía inicial de 10 keV y 1000 keV. Para la obtención de estos datos se utilizó *WebPlotDigitizer* [34], ya que se facilitaban gráficamente y se tuvieron que extraer de manera numérica.

En primer lugar, se han observado las diferencias entre las distintas listas de físicas visualmente. Una comparación punto a punto no ha sido posible debido a que los valores del eje x de las simulaciones no coincidían con los del código de referencia exactamente.

Para también abordar una comparación numérica, se han realizado unos ajustes polinómicos en torno a los máximos de las figuras, presentadas en el capítulo 3, mediante la siguiente expresión

$$f(x) = a + b(x - c)^2 \implies (x_{\max}, y_{\max}) = (c, a). \quad (2.3)$$

De esta forma, como pueden obtenerse las coordenadas x_{\max} e y_{\max} directamente, los errores de las mismas son menores que en un ajuste convencional del tipo $f(x) = ax^2 + bx + c$. Donde la coordenada x_{\max} se tendría que obtener de manera indirecta, y su incertidumbre mediante propagación de errores. Resulta de interés comparar la posición de los máximos de las curvas DPK, ya que se corresponde con el punto de máxima deposición de energía de los electrones en el medio.

Además, dado que el r_0 de normalización es distinto en cada simulación con una lista de física determinada, se ha tabulado y contrastado con el proporcionado por la base de datos del NIST [35]. Esto sucede porque r_0 se calcula mediante la clase `G4EmCalculator`,

la cual devuelve un alcance CSDA dependiendo de la lista de física escogida.

Se realizaron de nuevo las gráficas reescalando la coordenada x de los puntos,

$$(x_i, y_i) \implies \left(x_i \cdot \frac{r_0^k}{r_0^{\text{NIST}}}, y_i \right). \quad (2.4)$$

Así, se consigue que todas las listas de física estén normalizadas a un mismo r_0^{NIST} . Donde el subíndice i se refiere al punto considerado de todos los obtenidos en la simulación, mientras que el superíndice k a la lista de física considerada. Es decir, r_0^k se corresponde con el alcance CSDA computado con una lista de física determinada k .

PENG4

En PENG4 se han optimizado sus parámetros característicos, utilizando los valores mencionados en la sección 2.1.1. Para ello, se han apreciado los efectos de los mismos sobre las simulaciones visualmente.

Además, se ha realizado la misma comparación numérica que en GEANT4 con los parámetros óptimos de PENG4. Haciéndose un ajuste polinómico alrededor del máximo mediante la ecuación 2.3, y calculando los valores de sus coordenadas.

En cuanto a la comparación del r_0 de normalización, este carece de interés en PENG4. El motivo de ello es que la clase que computa el alcance CSDA en las simulaciones es `G4EmCalculator`. Como la lista de física de PENG4 es externa a GEANT4, `G4EmCalculator` realiza el cálculo directamente con `emstandard_opt4`. Es decir, el macro `berger-PenG4.mac` está adaptado para realizar la simulación con PENG4. Sin embargo, en la estimación de r_0 continúa prevaleciendo la física de GEANT4.

GEANT4 vs PENG4

También resulta de gran interés el contraste entre los dos códigos de trabajo, GEANT4 y PENG4. Por ello, se realizaron unas figuras con la lista de física más precisa de GEANT4, `emstandard_opt4`, los parámetros óptimos de PENG4 y los datos del código de referencia; EGSnrc en agua, y FLUKA y PENELOPE en hueso. De esta forma, considerando el mismo rango energético que en las simulaciones con GEANT4 y comparando visualmente ambos códigos, se consigue finalmente verificar PENG4.

3. Resultados y discusión

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en las distintas simulaciones, además de una discusión detallada y análisis exhaustivo de los mismos.

3.1. GEANT4

En la figura 4 se presentan los DPK obtenidos con unas determinadas listas de física de GEANT4 para una haz de e^- en agua con distintos valores de E_0 , concretamente, 10 keV, 15 keV, 100 keV y 1000 keV.

Dado que los electrones depositan su energía en el material gradualmente, las distribuciones DPK son continuas y cambian su forma según la energía inicial de las partículas lanzadas en un mismo medio. A medida que E_0 aumenta de 10 keV a 100 keV, se observa que los máximos se desplazan a valores mayores, tanto en la coordenada x como en la y . Sin embargo, en 1000 keV hay una disminución de los mismos con respecto a 100 keV. Además, la energía es totalmente depositada con anterioridad conforme E_0 se incrementa. Es decir, la curva DPK se aproxima finalmente a un valor nulo a una distancia r/r_0 menor. En la figura 4a con 10 keV, se aprecia deposición de energía incluso en la última capa correspondiente a $r = 1.2 r_0$, mientras que con 1000 keV en la figura 4d esta es nula prácticamente para radios superiores a r_0 .

Por otra parte, se observa que la discrepancia entre las simulaciones con las listas de física de GEANT4 y el código EGSnrc disminuye según E_0 crece. En general, la descripción detallada de la interacción radiación materia es compleja. Aún más si consideramos electrones, donde se dan un gran número de procesos hasta que alcanzan el reposo y predominan los eventos intensos. GEANT4 utiliza un algoritmo de historias condensadas clase I, que consiste en descomponer la trayectoria de cada partícula en un número de *steps* y describir el efecto global de todas las interacciones que ocurren a lo largo de uno utilizando modelos de dispersiones múltiples. En este caso, la pérdida de energía por eventos suaves se considera depositada a lo largo de la recta que une el punto *pre-step* y *post-step*. Resulta claro en la figura 4, que la aproximación empleada por GEANT4 funciona mejor cuanto más alta sea la energía, donde los eventos suaves prevalecen frente a los intensos. Aún así, GEANT4 reproduce el experimento considerado de manera razonablemente satisfactoria, conservando una forma de la distribución DPK similar al código de referencia.

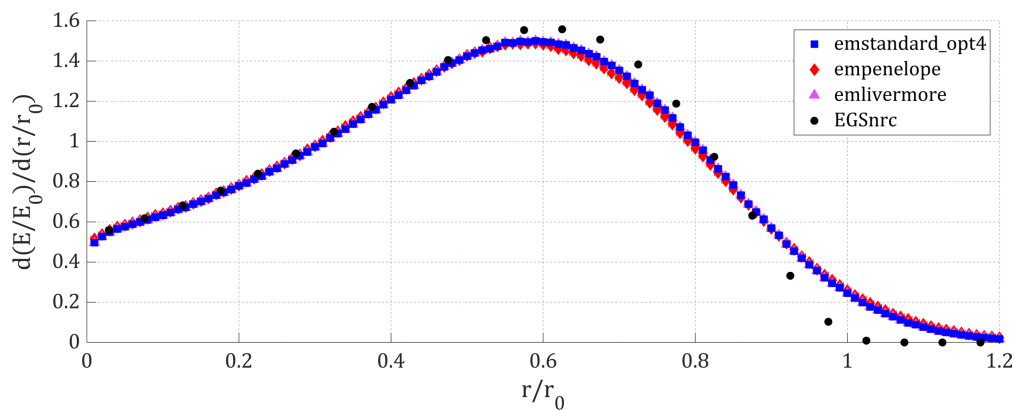
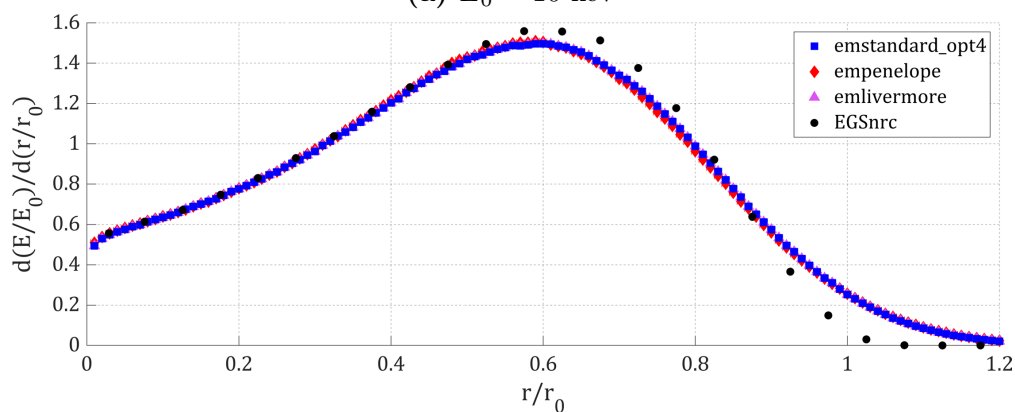
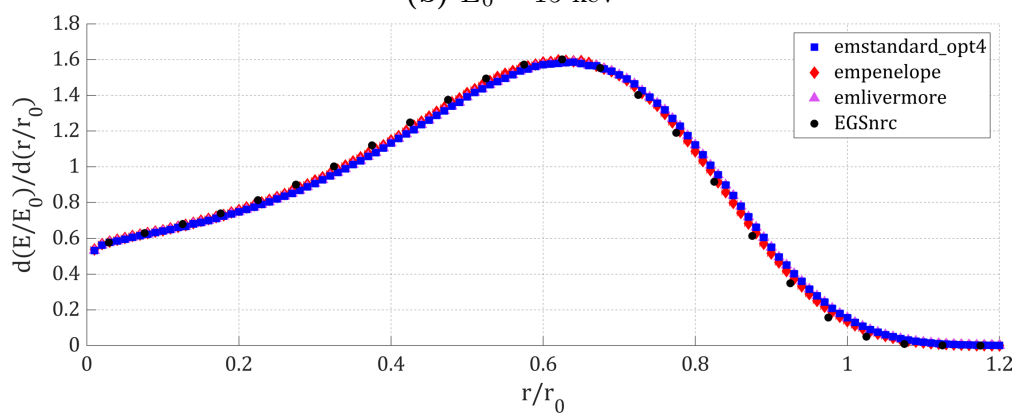
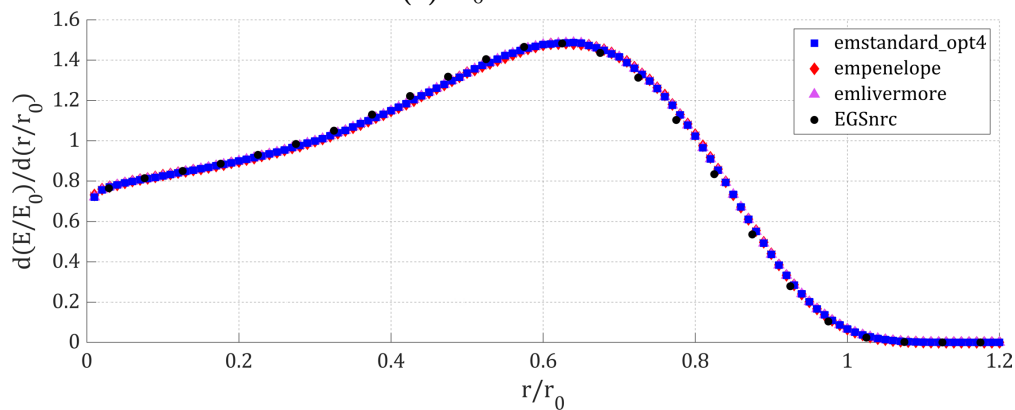
(a) $E_0 = 10$ keV(b) $E_0 = 15$ keV(c) $E_0 = 100$ keV(d) $E_0 = 1000$ keV

Figura 4: DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en agua con distintos valores de E_0 .

	$E_0 = 10$ keV		$E_0 = 15$ keV	
	x_{\max}	y_{\max}	x_{\max}	y_{\max}
ems_opt4	0.5851 ± 0.0021	1.4980 ± 0.0025	0.5889 ± 0.0016	1.4970 ± 0.0025
emliv	0.5851 ± 0.0021	1.4980 ± 0.0025	0.5889 ± 0.0016	1.4970 ± 0.0025
empen	0.5751 ± 0.0014	1.4890 ± 0.0020	0.5831 ± 0.0016	1.5040 ± 0.0025
EGSnrc	0.6013 ± 0.011	1.562 ± 0.021	0.605 ± 0.025	1.565 ± 0.025

	$E_0 = 100$ keV		$E_0 = 1000$ keV	
	x_{\max}	y_{\max}	x_{\max}	y_{\max}
ems_opt4	0.6290 ± 0.0015	1.581 ± 0.003	0.6236 ± 0.0015	1.486 ± 0.003
emliv	0.6290 ± 0.0015	1.581 ± 0.003	0.6236 ± 0.0015	1.486 ± 0.003
empen	0.6230 ± 0.0015	1.593 ± 0.004	0.6265 ± 0.0012	1.4840 ± 0.0025
EGSnrc	0.616 ± 0.024	1.598 ± 0.025	0.610 ± 0.025	1.482 ± 0.025

Tabla 5: Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.

	$E_0 = 10$ keV		$E_0 = 15$ keV	
	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %
ems_opt4	2.69	4.10	2.63	4.35
emliv	2.69	4.10	2.63	4.35
empen	4.36	4.67	3.59	3.90

	$E_0 = 100$ keV		$E_0 = 1000$ keV	
	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %
ems_opt4	2.06	1.06	2.20	0.27
emliv	2.06	1.06	2.20	0.27
empen	1.09	0.31	2.67	0.13

Tabla 6: Errores relativos de los máximos presentados en la tabla 5 con respecto a EGSnrc.

En cuanto al análisis entre las propias listas de física de GEANT4, resulta relevante realizar una comparación numérica empleando la tabla 5, donde se presentan los máximos obtenidos mediante ajustes polinómicos de las distribuciones DPK. Dado que el error relativo da cuenta de la precisión de una magnitud, se ha calculado el correspondiente a cada lista de física y energía E_0 con respecto al código de referencia en agua, EGSnrc. Se ha atendido al siguiente criterio en todas las comparaciones realizadas en este capítulo:

- Si $\varepsilon < 0.1 \%$, el acuerdo se considera excelente.
- Si $0.1 \% \leq \varepsilon \leq 5 \%$, el acuerdo es aceptable.
- Si $\varepsilon > 5 \%$, el acuerdo es mejorable.

En la tabla 6, se observa que todos los errores relativos son inferiores al 5 %. Por ello, se verifica que las listas de física de GEANT4 reproducen el máximo de deposición de energía adecuadamente.

Además, se aprecia que para cualquier E_0 , los puntos obtenidos con `emstandard_opt4` y `emlivermore` se solapan totalmente. Esto era de esperar, ya que `emstandard_opt4` se desarrolló posteriormente a `emlivermore`, utilizando su lista de física a bajas energías como fue descrito en la sección 2.1.1. Es decir, para las partículas consideradas en el rango energético trabajado, los modelos físicos instaurados en ambas listas coinciden; manifestándose claramente tanto en la figura 4 como en la tabla 6. Si se atiende a la lista de física que presenta un menor error relativo en el máximo respecto al código de referencia, se obtienen distintos resultados en función de E_0 y la coordenada (x o y). A 10 keV, `emstandard_opt4` se aproxima más a los datos de EGSnrc. A 100 keV, lo hace `empenelope`. Mientras que a 15 keV y 1000 keV, el error relativo de x_{\max} es menor con `emstandard_opt4`, e y_{\max} con `empenelope`.

Cada uno de los modelos disponibles en GEANT4 son más o menos apropiados según el experimento considerado, atendiendo al tipo de partícula, rango energético e incluso material. Esto se pone de manifiesto, ya que los resultados son más precisos en algunas ocasiones con `emstandard_opt4` y en otras con `empenelope`. Por tanto, la elección de una determinada lista de física depende de las características de la simulación. Sin embargo, se observa en la tabla 6 que las diferencias relativas respecto al código de referencia son generalmente inferiores con `emstandard_opt4`. Ya que `empenelope` incluso alcanza un

E_0 (keV)	r_0 (g/cm ³)			
	emstandard_opt4	emlivermore	empenelope	NIST
10	2.481×10^{-4}	2.481×10^{-4}	2.475×10^{-4}	2.515×10^{-4}
15	5.054×10^{-4}	5.054×10^{-4}	5.064×10^{-4}	5.148×10^{-4}
100	1.419×10^{-2}	1.419×10^{-2}	1.413×10^{-2}	1.431×10^{-2}
1000	4.377×10^{-1}	4.377×10^{-1}	4.334×10^{-1}	4.367×10^{-1}

Tabla 7: Valores de r_0 computados para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.

error relativo del 4.67 % en una ocasión, mientras que `emstandard_opt4` no supera el 4.36 %. Por tanto, se confirma que `emstandard_opt4` es la lista de física más precisa de las estudiadas en este trabajo con GEANT4.

No obstante, los datos de EGSnrc no se corresponden con experimentales, simplemente se utilizan de referencia como método de comparación entre distintos códigos. De hecho, no existen datos experimentales disponibles en cuanto a DPK. La validación experimental del transporte de electrones se realiza mediante otro tipo de medidas, como dispersiones al atravesar láminas de un grosor determinado.

Por otro lado, el r_0 de normalización para cada lista y energía E_0 es diferente, ya que es calculado por GEANT4 al realizar cada simulación. Se presenta la tabla 7 para dejar constancia de este hecho e ilustrar los valores proporcionados por el NIST [35]. Por esta razón, se ha reescalado la coordenada x de las simulaciones con GEANT4 de manera que la distancia esté normalizada a r_0^{NIST} en todas ellas. Sin embargo, en la figura 5 se observa que este reescalado afecta muy levemente. Si se realiza de nuevo un ajuste polinómico en torno a los máximos, la coordenada x_{max} se ve modificada, tal y como se ha ilustrado en la tabla 8.

Los errores relativos de x_{max} respecto al código de referencia, tras realizar el reescalado de la coordenada x de las simulaciones con GEANT4, se presentan en la tabla 9. Sin embargo, no se aprecian variaciones significativas respecto a los resultados de la tabla 6, donde aún no se había llevado a cabo el reescalado. Observándose que en ocasiones la precisión mejora y en otras empeora. Por tanto, se concluye que normalizar las curvas DPK al r_0 computado con la lista de física correspondiente es consistente, aunque formalmente sea más correcto comparar simulaciones normalizadas a un mismo alcance CSDA.

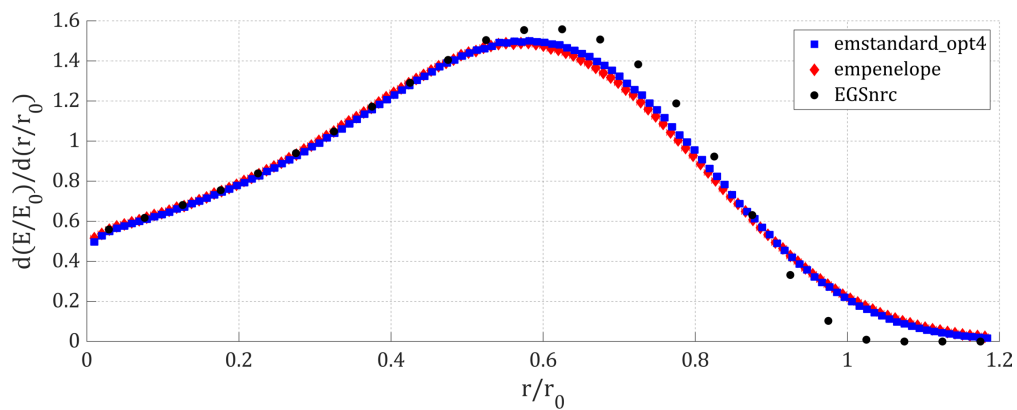
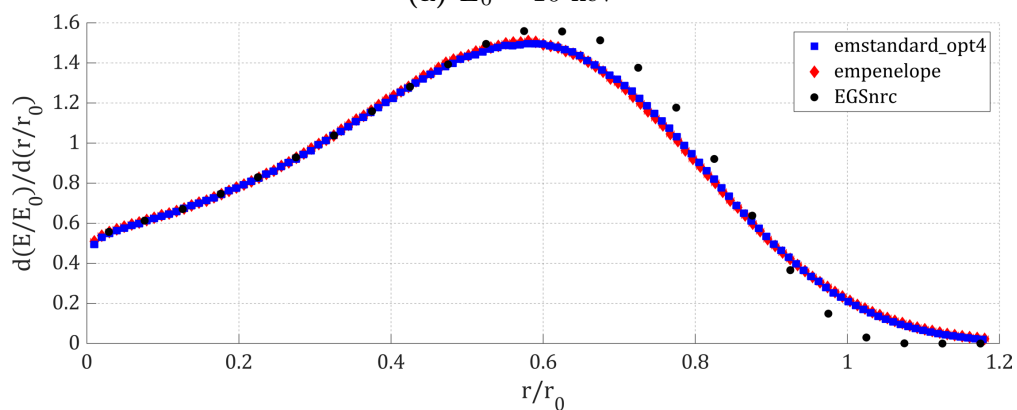
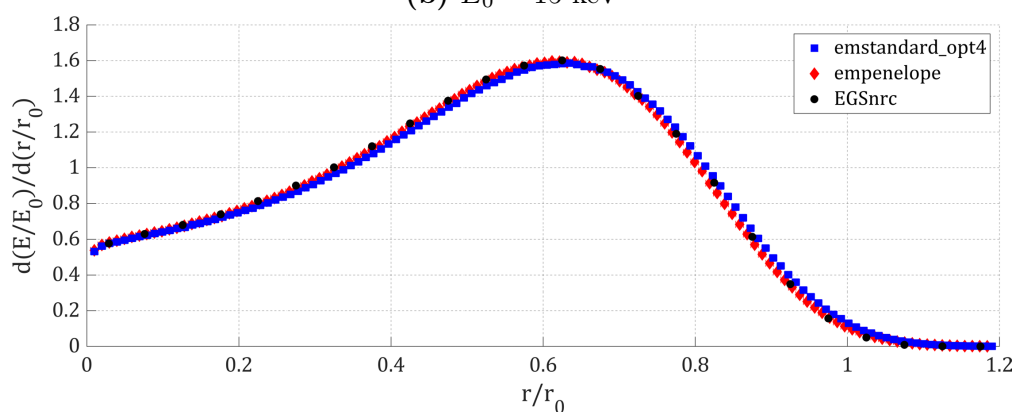
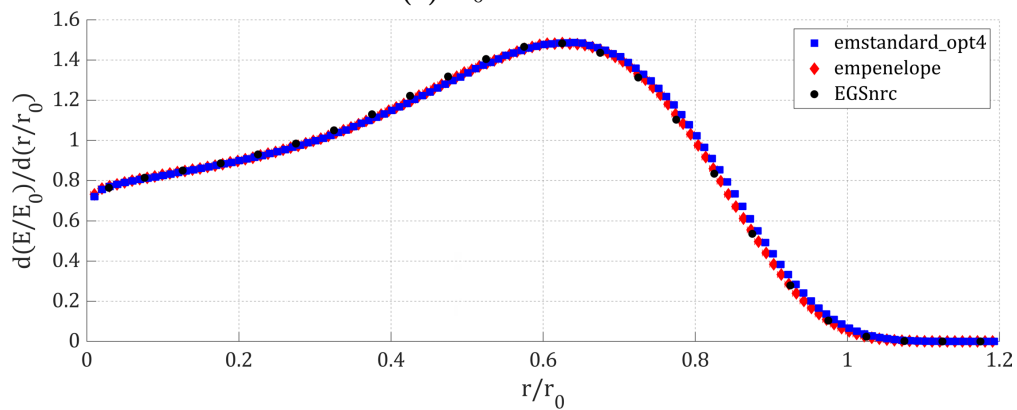
(a) $E_0 = 10$ keV(b) $E_0 = 15$ keV(c) $E_0 = 100$ keV(d) $E_0 = 1000$ keV

Figura 5: DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST} .

E_0 (keV)	x_{\max}		
	emstandard_opt4	emlivermore	empenelope
10	0.5772 ± 0.0020	0.5772 ± 0.0020	0.5659 ± 0.0014
15	0.5781 ± 0.0016	0.5781 ± 0.0016	0.574 ± 0.009
100	0.6237 ± 0.0015	0.6237 ± 0.0015	0.6147 ± 0.0015
1000	0.6250 ± 0.0016	0.6250 ± 0.0016	0.6218 ± 0.0012

Tabla 8: x_{\max} mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 , cada lista de física de GEANT4 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST} .

E_0 (keV)	$\varepsilon(x_{\max})$ %		
	emstandard_opt4	emlivermore	empenelope
10 keV	4.01	4.01	5.89
15 keV	4.41	4.41	1.99
100 keV	1.20	1.20	0.26
1000 keV	2.43	2.43	1.90

Tabla 9: Errores relativos de los x_{\max} presentados en la tabla 8 con respecto a EGSnrc.

Tras el análisis exhaustivo de GEANT4 para el experimento considerado en agua, se quiso corroborar su validez en un medio de interés clínico. Por ello, se repitieron las simulaciones en hueso (*Compact Bone*, ICRU), tal y como se presentan en la figura 6. En este caso, se realizó la comparación con resultados ya publicados [30], como se comentó en la sección 2.2.

Visualmente, se observa que las discrepancias obtenidas con 10 keV son menores que con 1000 keV, a diferencia de los resultados recogidos en agua. Asimismo, se ha realizado una comparación numérica, realizando ajustes polinómicos en torno a los máximos y disponiéndolos en la tabla 10. Además, los r_0 de normalización calculados con cada lista de física de GEANT4 también se han registrado en la tabla 12, junto con los valores proporcionados por el NIST [35].

Para realizar una estimación numérica del grado de acuerdo, expresamos las diferencias en términos relativos. En esta ocasión, respecto a FLUKA y PENELOPE, tal y como se observa en la tabla 11. En general, las discrepancias se encuentran dentro del umbral

	$E_0 = 10 \text{ keV}$		$E_0 = 1000 \text{ keV}$	
	x_{\max}	y_{\max}	x_{\max}	y_{\max}
ems_opt4	0.5385 ± 0.0013	1.5800 ± 0.0025	0.5711 ± 0.0013	1.562 ± 0.003
emliv	0.5385 ± 0.0013	1.5800 ± 0.0025	0.5711 ± 0.0013	1.562 ± 0.003
empen	0.5335 ± 0.0009	1.5910 ± 0.0020	0.5711 ± 0.0015	1.568 ± 0.004
FLUKA	0.537 ± 0.003	1.569 ± 0.003	0.549 ± 0.003	1.561 ± 0.005
PENELOPE	0.515 ± 0.011	1.584 ± 0.021	0.549 ± 0.003	1.561 ± 0.005

Tabla 10: Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.

	$E_0 = 10 \text{ keV}$			
	$\varepsilon_F(x_{\max}) \%$	$\varepsilon_F(y_{\max}) \%$	$\varepsilon_P(x_{\max}) \%$	$\varepsilon_P(y_{\max}) \%$
ems_opt4	0.37	0.70	4.52	0.25
emliv	0.37	0.70	4.52	0.25
empen	0.56	1.40	3.55	0.44

	$E_0 = 1000 \text{ keV}$			
	$\varepsilon_F(x_{\max}) \%$	$\varepsilon_F(y_{\max}) \%$	$\varepsilon_P(x_{\max}) \%$	$\varepsilon_P(y_{\max}) \%$
ems_opt4	6.91	2.62	4.03	0.06
emliv	6.91	2.62	4.03	0.06
empen	7.23	2.56	4.34	0.13

Tabla 11: Errores relativos de los máximos presentados en la tabla 10 respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).

que hemos considerado aceptable, a excepción de $\varepsilon_F(x_{\max})$ a $E_0 = 1000 \text{ keV}$; que se corresponde con el error relativo respecto a FLUKA a esa energía inicial. De nuevo, las discrepancias relativas son generalmente inferiores con `emstandard_opt4`, confirmándose que es la lista más precisa de las trabajadas con GEANT4.

Además, se volvió a realizar un reescalado de la coordenada x de las simulaciones con GEANT4, de manera que todas las distancias radiales estuviesen normalizadas a un mismo alcance CSDA, r_0^{NIST} . Se observa en la figura 7, que los cambios no son significativos y el reescalado continúa influyendo levemente. Asimismo, en la tabla 14 se presentan los nuevos errores relativos obtenidos para x_{\max} , mostrados en la tabla 13. Comparándolos

con los de la tabla 11, donde aún no se había realizado el reescalado, vemos que la precisión varía. Mejorándose en algunas ocasiones, mientras que en otras sucede al contrario.

Por tanto, se concluye que las listas de física de GEANT4 son aplicables a otro medio de interés clínico, concretamente a hueso (*Compact Bone*, ICRU). Aunque `emstandard_opt4` se corresponda con la lista más precisa de GEANT4 generalmente, la más apropiada en una situación determinada dependerá de las características de la simulación.

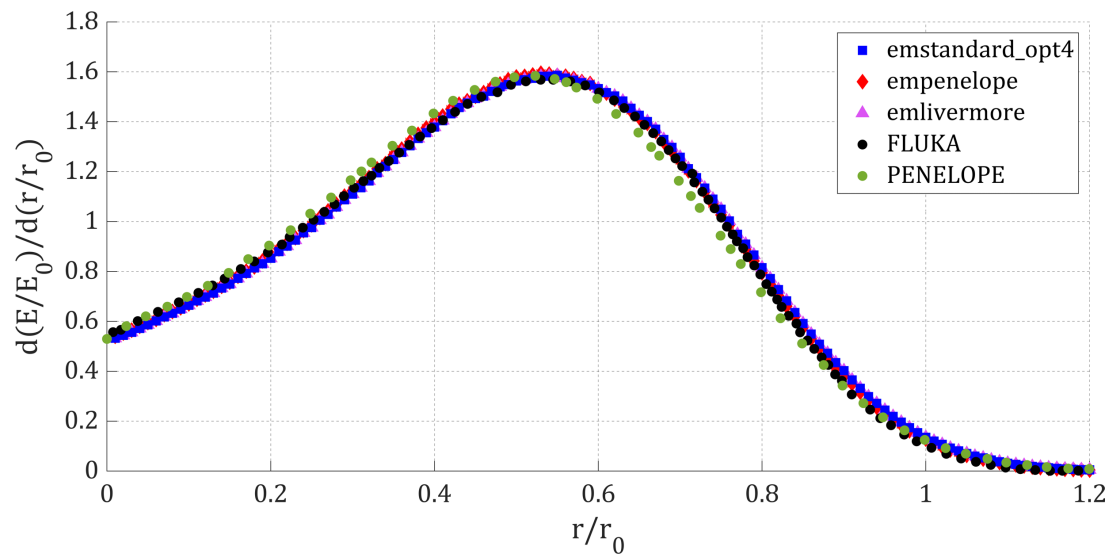
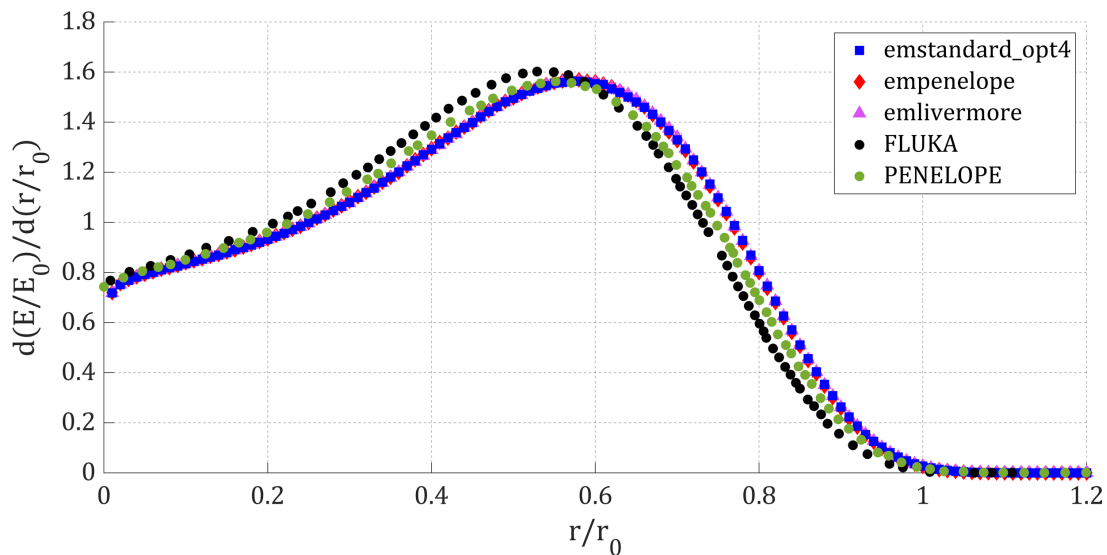
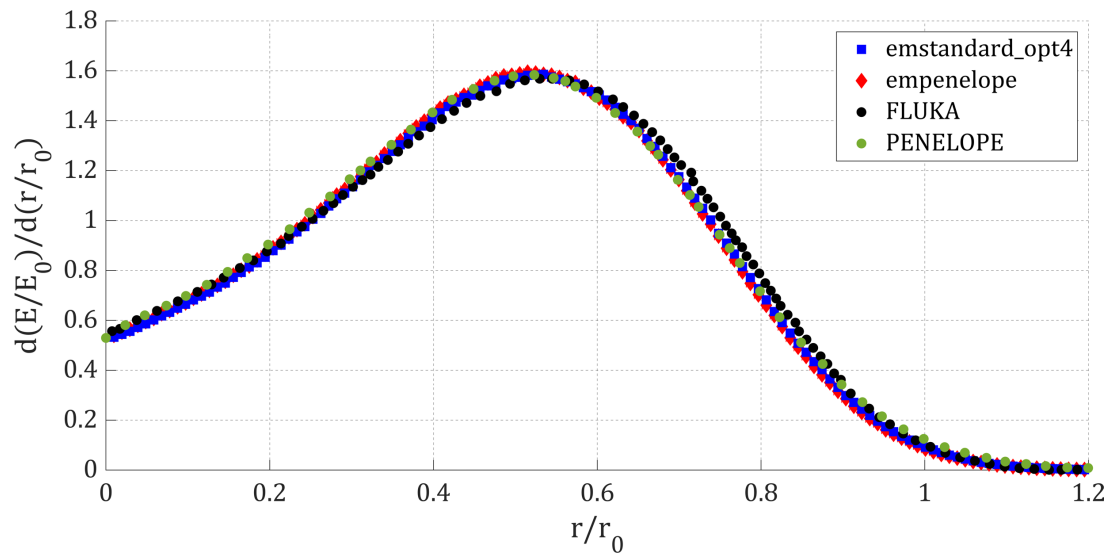
(a) $E_0 = 10$ keV(b) $E_0 = 1000$ keV

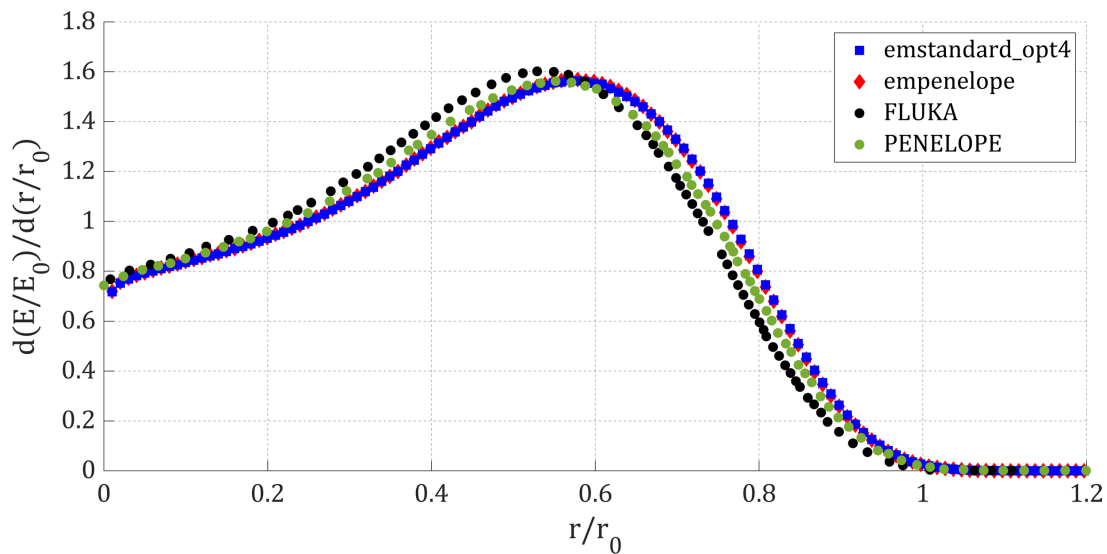
Figura 6: DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en hueso con distintos valores de E_0 .

E_0 (keV)	r_0 (g/cm ³)			
	emstandard_opt4	emlivermore	empenelope	NIST
10	2.683×10^{-4}	2.683×10^{-4}	2.721×10^{-4}	2.761×10^{-4}
1000	4.699×10^{-1}	4.699×10^{-1}	4.712×10^{-1}	4.711×10^{-1}

Tabla 12: Valores de r_0 computados para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y cada lista de física de GEANT4.



(a) $E_0 = 10$ keV



(b) $E_0 = 1000$ keV

Figura 7: DPK de las simulaciones con GEANT4 para un haz de e^- en hueso con distintos valores de E_0 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST} .

E_0 (keV)	x_{\max}		
	emstandard_opt4	emlivermore	empenelope
10	0.5232 ± 0.0012	0.5232 ± 0.0012	0.5246 ± 0.0025
1000	0.5696 ± 0.0012	0.5696 ± 0.0012	0.5712 ± 0.0015

Tabla 13: x_{\max} mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 , cada lista de física de GEANT4 y un reescalado radial para normalizar a r_0^{NIST} .

	$E_0 = 10$ keV		$E_0 = 1000$ keV	
	$\varepsilon_{\text{F}}(x_{\max})$ %	$\varepsilon_{\text{P}}(x_{\max})$ %	$\varepsilon_{\text{F}}(x_{\max})$ %	$\varepsilon_{\text{P}}(x_{\max})$ %
ems_opt4	2.48	1.55	6.63	3.75
emliv	2.48	1.55	6.63	3.75
empen	2.22	1.82	6.93	4.04

Tabla 14: Errores relativos de los x_{\max} presentados en la tabla 13 respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).

3.2. PENG4

En este apartado, se presentan las figuras correspondientes a los DPK obtenidos en PENG4, con el objetivo de optimizar sus parámetros característicos mediante un análisis visual de los mismos.

Influencia de C_1 y C_2

En la figura 8 aparecen los DPK adquiridos mediante simulaciones con PENG4 en agua, para distintos valores de C_1 y C_2 . En la ampliación realizada dentro de la propia gráfica, se observa un pequeño transitorio para distancias radiales próximas al origen, que se hace más pronunciado a medida que ambos parámetros se incrementan. La explicación de este hecho reside en las aproximaciones utilizadas por el propio código.

PENG4 utiliza un algoritmo de historias condensadas clase II, donde los eventos intensos son simulados detalladamente y se utilizan modelos de dispersiones múltiples para las interacciones suaves, como se ha explicado en la sección 1.5.2. El umbral de deflexión entre colisiones elásticas suaves e intensas se controla mediante C_1 y C_2 , simulándose de manera detallada aquellas por encima de los límites impuestos [23]. Un aumento de los

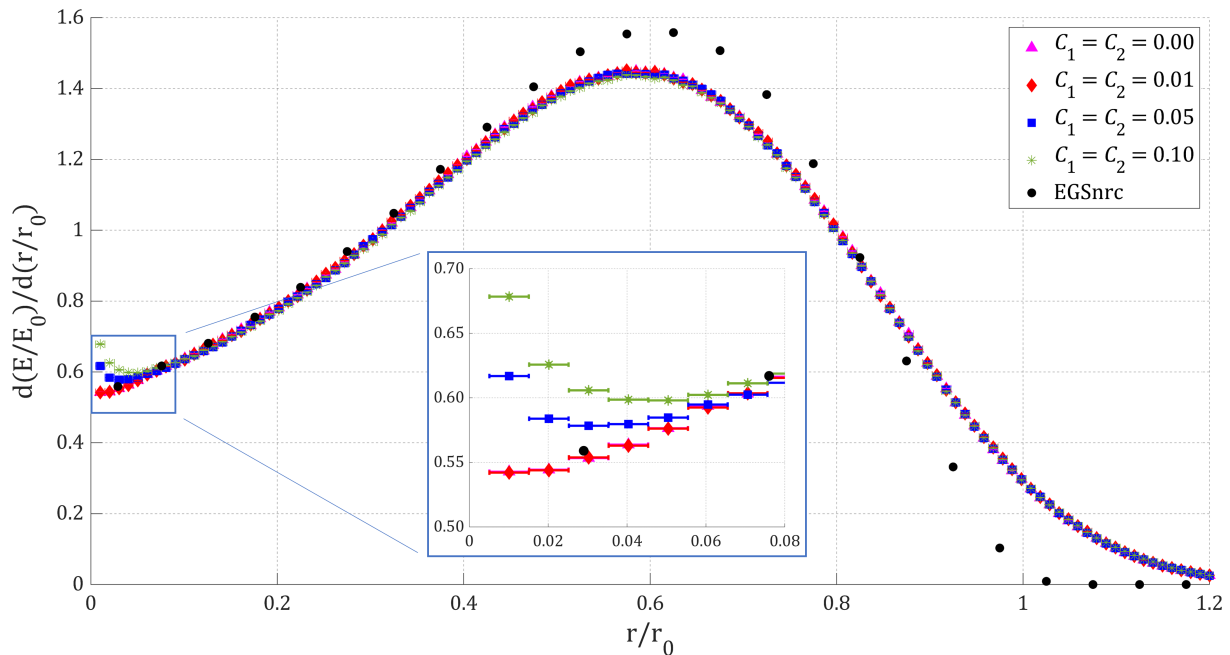


Figura 8: Influencia de C_1 y C_2 sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 2 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 10$ keV.

valores de estos parámetros, supone un incremento del camino libre medio entre eventos intensos, es decir, una reducción del número de interacciones intensas simuladas. Por un lado, esto repercute en el tiempo de simulación, que se verá disminuido. Mientras que por otro, también implica que la aproximación de dispersiones múltiples para eventos suaves se implemente cuando la cantidad de interacciones aún no es suficiente como para que el algoritmo funcione correctamente. Por tanto, el transitorio de la figura 8 manifiesta la utilización de una aproximación inválida. La convergencia de las curvas de simulación con las de referencia se alcanza cuando el número de interacciones es elevado; y por ende, la aproximación de dispersiones múltiples puede aplicarse correctamente.

Debe escogerse el valor de C_1 y C_2 , de manera que el transitorio sea inexistente y el tiempo de simulación el más breve posible. Como este último aumenta cuanto menor sea C_1 y C_2 , ya que se realiza la simulación detallada de un mayor número de eventos intensos, se concluye finalmente que el valor óptimo es $C_1 = C_2 = 0.01$.

Influencia de E_{ABS}

En la figura 9 aparecen los DPK obtenidos mediante simulaciones con PENG4 en agua, para distintos valores de E_{ABS} . Con esta se pretende analizar su valor respecto a la elección de los umbrales W_{CC} y W_{CR} .

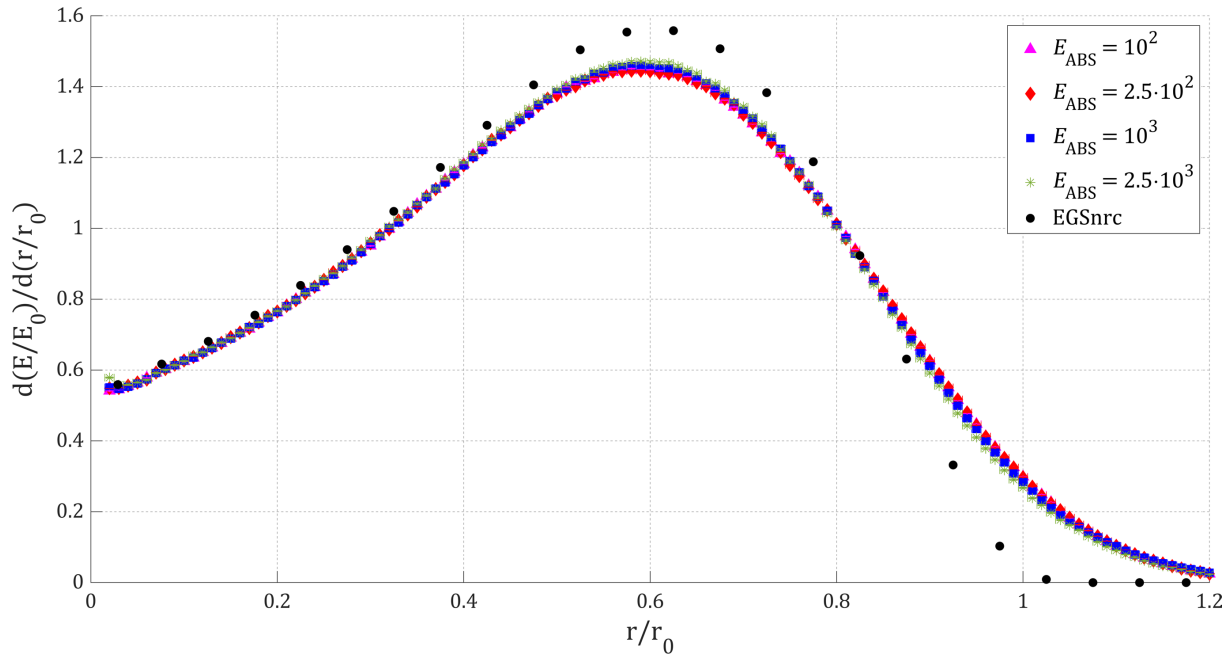


Figura 9: Influencia de E_{ABS} sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 3 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 10$ keV.

La simulación de una partícula termina cuando su energía se hace inferior a E_{ABS} o abandona totalmente el volumen considerado. Por ello, E_{ABS} nunca puede ser superior a la energía inicial del haz de electrones E_0 . Cuando los electrones son lanzados, interactúan con el medio depositando su energía. Si E_{ABS} es demasiado grande, aquellos con una energía inferior son absorbidos y se finaliza su simulación [23]. Por tanto, se debe imponer un valor a E_{ABS} que permita todos los procesos que las partículas de interés experimentarían.

Por un lado, cuando $E_{\text{ABS}} < W_{\text{CC}} = W_{\text{CR}}$ se puede perder información sobre electrones secundarios con energías superiores a E_{ABS} . Por otro lado, cuando $E_{\text{ABS}} > W_{\text{CC}} = W_{\text{CR}}$ aparece un pequeño transitorio al comienzo de la simulación, indicando la invalidez de las aproximaciones del propio código. Por tanto, resulta conveniente escoger $E_{\text{ABS}} = W_{\text{CC}} = W_{\text{CR}}$.

Sin embargo, para saber exactamente qué valor proporcionar a este conjunto de parámetros, se debe realizar un último estudio con PENG4.

Influencia de W_{CC} y W_{CR}

En la figura 10 aparecen los DPK adquiridos mediante simulaciones con PENG4 en

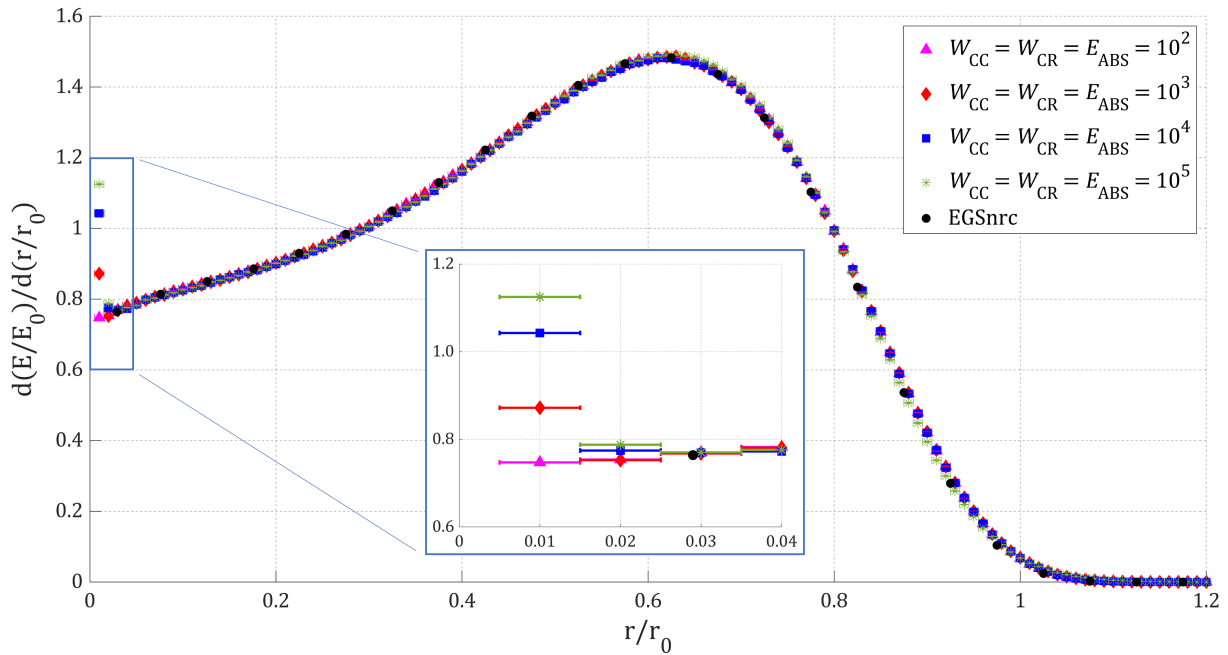


Figura 10: Influencia de W_{CC} y W_{CR} sobre los DPK de las simulaciones con PENG4 con los parámetros de la tabla 4 para un haz de e^- en agua con $E_0 = 1000$ keV.

agua, para distintos valores de $W_{CC} = W_{CR} = E_{ABS}$.

Se observa un transitorio en distancias radiales próximas al origen, que se hace más pronunciado a medida que ambos parámetros se elevan. Su explicación es análoga a lo que ocurría con C_1 y C_2 . En PENG4, los umbrales de pérdidas de energía entre interacciones suaves e intensas, se controlan mediante W_{CC} , para colisiones inelásticas; y W_{CR} , para emisiones *bremsstrahlung*. De esta forma, aquellos procesos con pérdidas de energía superiores a los límites impuestos se consideran intensos y se simulan individualmente. Estos parámetros influyen en la resolución de la distribución de energía, distorsionándose cuando adquieren valores demasiado grandes. Al incrementarlos, se tiene en cuenta un menor número de eventos intensos. Es decir, se utiliza la aproximación para procesos suaves con anterioridad, cuando no hay aún suficientes interacciones y esta carece de validez.

Por ello, se decide escoger finalmente $E_{ABS} = W_{CC} = W_{CR} = 10^2$ eV, cumpliéndose que el transitorio sea inexistente y el tiempo de simulación el más breve posible.

3.3. GEANT4 vs PENG4

En la figura 11 se presentan los DPK obtenidos mediante simulaciones con la lista `emstandard_opt4` de Geant4 y los parámetros óptimos de PENG4 en agua.

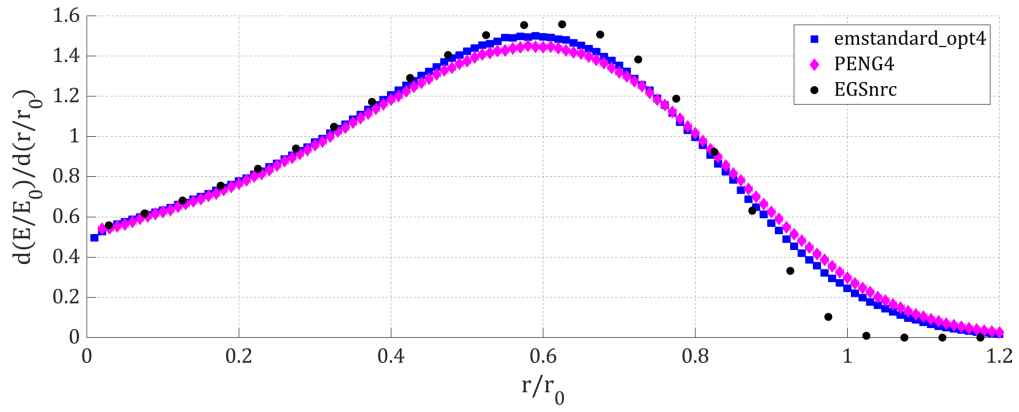
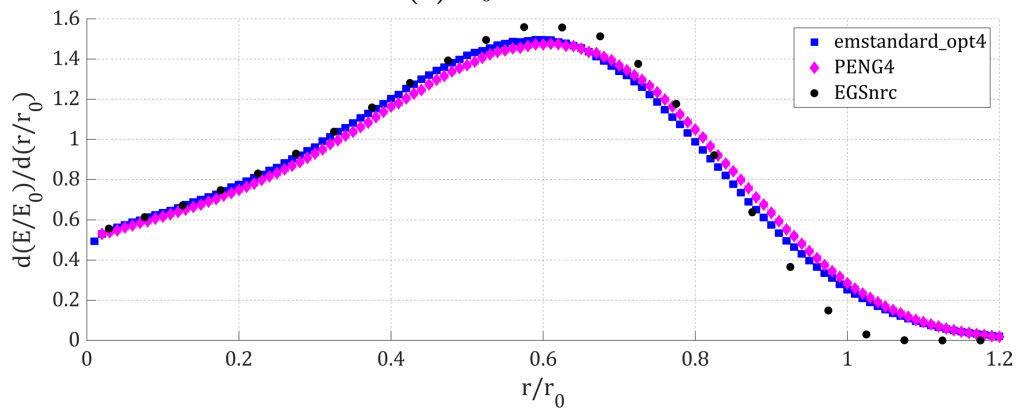
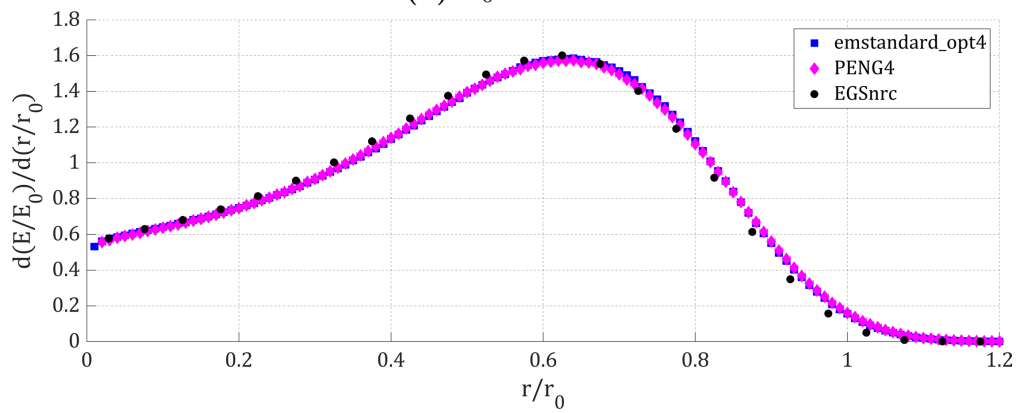
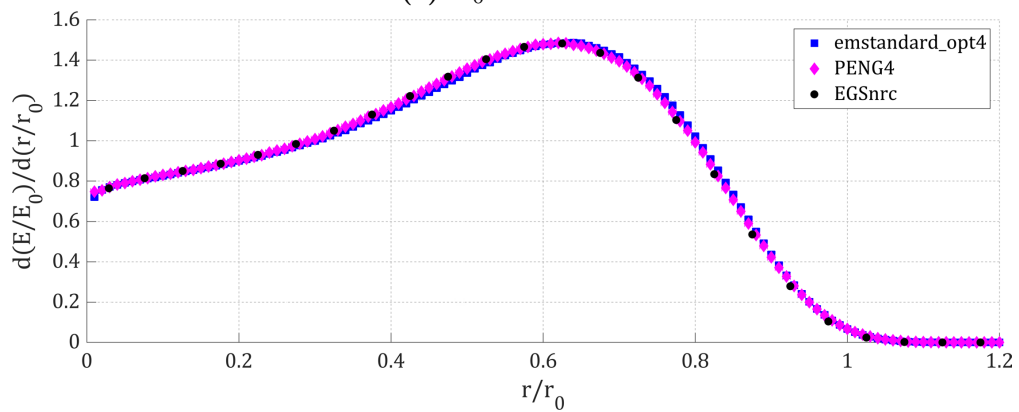
(a) $E_0 = 10$ keV(b) $E_0 = 15$ keV(c) $E_0 = 100$ keV(d) $E_0 = 1000$ keV

Figura 11: DPK de las simulaciones con `emstandard_opt4` de GEANT4 y los parámetros óptimos de PENG4, para un haz de e^- en agua con distintos E_0 .

E_0 (keV)	x_{\max}	y_{\max}
10	0.5878 ± 0.0023	1.4470 ± 0.0025
15	0.6026 ± 0.0019	1.4730 ± 0.0025
100	0.6247 ± 0.0020	1.5700 ± 0.0024
1000	0.6218 ± 0.0012	1.4840 ± 0.0023

Tabla 15: Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en agua con distintos E_0 y los parámetros óptimos de PENG4.

E_0 (keV)	GEANT4		PENG4	
	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %	$\varepsilon(x_{\max})$ %	$\varepsilon(y_{\max})$ %
10	2.69	4.10	2.25	7.35
15	2.63	4.35	0.35	5.88
100	2.06	1.06	1.36	1.75
1000	2.20	0.27	0.77	0.13

Tabla 16: Errores relativos de los máximos de GEANT4 con `emstandard_opt4` y PENG4 con los parámetros óptimos en agua respecto a EGSnrc.

Al igual que ocurría con las distintas listas de física de GEANT4, la discrepancia respecto a los datos del código de referencia disminuye a medida que E_0 se incrementa en PENG4.

Para hacer una comparación más consistente, resulta interesante obtener los máximos de las curvas DPK de PENG4 mediante un ajuste polinómico, como se ilustra en la tabla 15. Además, dado que el error relativo da cuenta de la precisión de una magnitud, se ha calculado nuevamente para x_{\max} e y_{\max} respecto al código de referencia. En la tabla 16, se presentan los errores relativos de los máximos tanto con GEANT4 como con los parámetros óptimos de PENG4 respecto a EGSnrc, para así facilitar la comparación entre ambos códigos. Se observa que los resultados para la coordenada y_{\max} son mejores con GEANT4, a excepción de $E_0 = 1000$ keV. Mientras que la discrepancia en x_{\max} es menor con PENG4 en cualquier caso. De esta forma, no sólo se demuestra que PENG4 presenta un acuerdo razonable con los valores de referencia, sino que además su acuerdo en cuanto a la posición radial del máximo de la curva mejora el observado para Geant4.

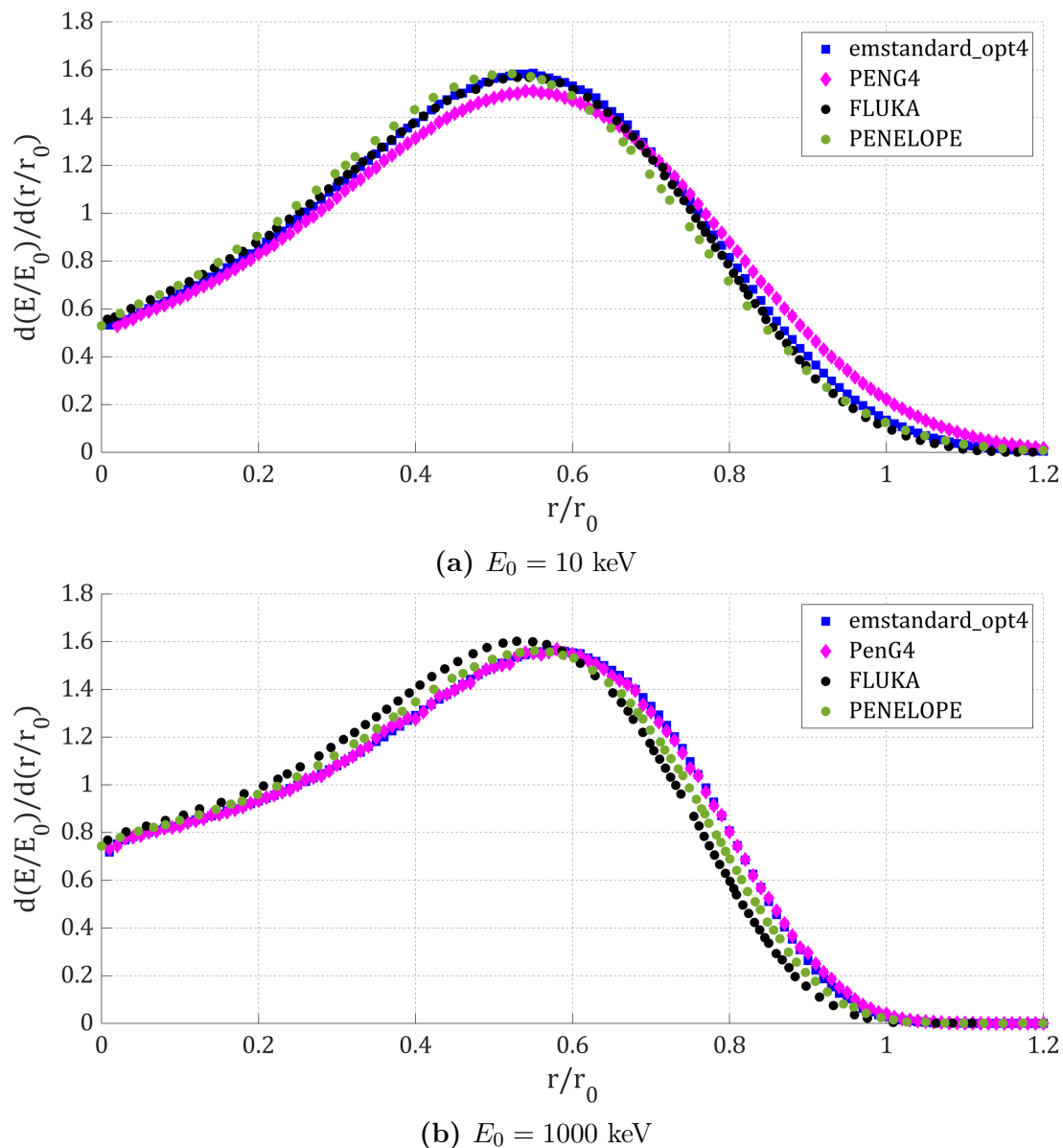


Figura 12: DPK de las simulaciones con `emstandard_opt4` de GEANT4 y los parámetros óptimos de PENG4, para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 .

Visualmente, se aprecia en la figura 11 que ambos códigos se aproximan menos entre sí a energías bajas. Los puntos comienzan a alejarse aproximadamente a partir de $r = 0.4r_0$ a 10 keV y a partir de $r = 0.1r_0$ a 15 keV, convergiendo en valores de r/r_0 próximos a la parte superior del rango estudiado. En cambio, a 100 keV y 1000 keV, los comportamientos descritos por GEANT4 y PENG4 son muy similares.

Dado que la verificación de PENG4 resulta satisfactoria en agua, también se quiso analizar otro material de interés clínico. Por ello, en la figura 12 se presentan los DPK obtenidos mediante simulaciones con la lista `emstandard_opt4` de Geant4 y los parámetros óptimos de PENG4 en hueso (*Compact Bone*, ICRU).

Asimismo, se realizaron ajustes polinómicos en torno a los máximos para PENG4, presentados en la tabla 17. Sus errores relativos respecto a los códigos FLUKA y PENELOPE, aparecen junto con los de `emstandard_opt4` de GEANT4 en la tabla 18. Aunque las discrepancias con PENG4 no sean inferiores a las de GEANT4 en cualquier caso, los resultados obtenidos son consistentes y coherentes de acuerdo a lo esperado. Confirmándose la posibilidad de extensión de PENG4 a otros medios materiales.

Mencionar que por motivos estéticos y de espacio, se han utilizado las siguientes abreviaturas `ems_opt4` (`emstandard_opt4`), `emliv` (`emlivermore`) y `empen` (`empenelope`) en algunas tablas presentadas en este capítulo.

E_0 (keV)	x_{\max}	y_{\max}
10	0.5438 ± 0.0013	1.5060 ± 0.0020
1000	0.5675 ± 0.0023	1.557 ± 0.006

Tabla 17: Máximos calculados mediante ajuste polinómico para un haz de e^- en hueso con distintos E_0 y los parámetros óptimos de PENG4.

$E_0 = 10$ keV				
	$\varepsilon_F(x_{\max})$ %	$\varepsilon_F(y_{\max})$ %	$\varepsilon_P(x_{\max})$ %	$\varepsilon_P(y_{\max})$ %
GEANT4	0.37	0.70	4.52	0.25
PENG4	1.36	4.02	5.55	4.92
$E_0 = 1000$ keV				
	$\varepsilon_F(x_{\max})$ %	$\varepsilon_F(y_{\max})$ %	$\varepsilon_P(x_{\max})$ %	$\varepsilon_P(y_{\max})$ %
GEANT4	6.91	2.62	4.04	0.06
PENG4	6.23	2.93	3.37	2.93

Tabla 18: Errores relativos de los máximos de GEANT4 con `emstandard_opt4` y PENG4 con los parámetros óptimos en hueso respecto a FLUKA (F) y PENELOPE (P).

4. Conclusiones

Se pueden extraer las siguientes conclusiones del trabajo presentado, cuya finalidad principal es verificar la validez del código PENG4 en cuanto al transporte de electrones por debajo de 1 MeV.

Hemos trabajado con dos códigos Monte Carlo distintos, GEANT4 y PENG4, para simular el transporte de un haz de electrones monoenergéticos a través de un medio, agua y hueso, con simetría esférica. Para ello, se ha utilizado la macro `berger.mac` del ejemplo `TestEm12` proporcionado en el repositorio oficial de GEANT4 y una adaptación de la misma, `berger-PenG4.mac`, para la implementación de PENG4.

Hemos empleado la estimación de *Dose Point Kernels* (DPK) para verificar la precisión y exactitud de ambos códigos. LLevándose a cabo tres procedimientos distintos de comparación, cuyos resultados más destacables son los siguientes:

- En GEANT4, hemos comparado tres listas de física diferentes `emstandard_opt4`, `emlivermore` y `empenelope`. La discrepancia respecto al código de referencia disminuye según la energía inicial de los electrones se incrementa y los errores relativos de los máximos de las curvas DPK se encuentran dentro del umbral de medida aceptable, correspondiente al 5%. Además, el alcance CSDA es calculado en cada simulación realizada con GEANT4, motivando llevar a cabo un reescalado de la coordenada radial de las distintas simulaciones para normalizarlas a un mismo valor, r_0^{NIST} . Sin embargo, se observa que el efecto de dicho reescalado es muy leve.

Ninguna lista de física se aproxima mejor al código de referencia en cualquier caso, concluyéndose que la elección de una determinada depende de las características de la simulación. Sin embargo, dado que las diferencias relativas son en general inferiores con `emstandard_opt4`, se considera la lista de física más precisa de las trabajadas con GEANT4. Además, también se ha corroborado la posibilidad de extensión a un medio de interés clínico, ya que los resultados obtenidos son satisfactorios tanto en agua como en hueso (*Compact Bone*, ICRU). No obstante, sería también necesario comprobar su validez en otros medios, como tejido blando o muscular.

- En PENG4, hemos optimizado en primer lugar sus parámetros característicos: C_1 , C_2 , W_{CR} , W_{CC} y E_{ABS} , estudiando visualmente la influencia de cada uno de ellos en

las curvas DPK . Para no observar un transitorio o deformación de la distribución a distancias radiales próximas al origen, y además garantizar que se realicen en el menor tiempo posible, hemos concluido que los valores óptimos son $C_1 = C_2 = 0.01$ y $W_{CR} = W_{CC} = E_{ABS} = 10^2$ eV.

- Por último, hemos comparado las simulaciones realizadas con la lista de física más precisa de GEANT4, `emstandard_opt4`, y los parámetros óptimos de PENG4. Nuevamente, la discrepancia respecto a los códigos de referencia disminuye a medida que la energía inicial de los electrones se aumenta y las diferencias relativas entre los máximos de las curvas DPK son, en general, inferiores al 5 %.

Dado que tanto GEANT4 como PENG4 se aproximan a los datos del código de referencia en agua, también hemos realizado simulaciones en hueso. Obteniendo resultados satisfactorios y coherentes de acuerdo a lo esperado nuevamente.

En conclusión, hemos analizado distintas listas de física de GEANT4, optimizado los parámetros característicos de PENG4 y comparado ambos códigos entre si, para lograr finalmente el propósito fundamental de este trabajo: La verificación del código PENG4 para transporte de electrones por debajo de 1 MeV mediante el cálculo de *Dose Point Kernels*.

Bibliografía

1. Sociedad Española de Oncología Médica. *Las cifras del cáncer es España 2023* inf. téc. (SEOM, 2023).
2. Instituto Nacional del Cáncer. *Investigación sobre el tratamiento del cáncer* <https://www.cancer.gov/espanol/investigacion/areas/tratamiento>. (accessed: 05.05.2023).
3. Cortés Giraldo, M. A. *Desarrollos y aplicaciones de GEANT4 para radioterapia y microdosimetría en detectores y circuitos integrados* Tesis doct. (Universidad de Sevilla, 2011).
4. Biblioteca Nacional de Medicina. *Radioterapia* <https://medlineplus.gov/spanish/ency/article/001918.htm>. (accessed: 06.05.2023).
5. Sociedad Española de Medicina Nuclear. *La Medicina Nuclear* <http://semnim.es/la-medicina-nuclear/>. (accessed: 05.05.2023).
6. International Atomic Energy Agency. *Dosimetry and Medical Radiation Physics* <https://www-naweb.iaea.org/nahu/DMRP/regularprogrammeactivities/qa.html>. (accessed: 05.05.2023).
7. García León, M. *Apuntes Técnicas Experimentales II: Interacción radiación materia* Departamento de Física Atómica y Nuclear. Facultad de Física. Universidad de Sevilla. 2023.
8. Leo, W. R. *Techniques for nuclear and particle physics experiments: a how-to approach* (Springer Science & Business Media, 2012).
9. Cortés Giraldo, M. A. *Apuntes Biofísica: Interacción radiación-materia* Departamento de Física Atómica y Nuclear. Facultad de Física. Universidad de Sevilla. 2023.
10. Knoll, G. F. *Radiation detection and measurement* (John Wiley & Sons, 2010).
11. Consejo de Seguridad Nuclear. *Tema 2: Interacción de la radiación con la materia* Protección Radiológica (PR) para Operar las Instalaciones de Rayos X. 2009.
12. Seltzer, S. M. *et al.* ICRU report 85: Fundamental quantities and units for ionizing radiation. *Journal of the ICRU* **11**, 30 (2011).
13. National Institute of Standards and Technology. *Appendix: Significance of Calculated Quantities* <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/appendix.html>. (accessed: 05.05.2023).

14. Salvat, F., Fernández-Varea, J. M. y Sempau, J. PENELOPE-2006: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. *Workshop proceedings* **4**, 7 (2006).
15. Baratto Roldán, A. *Development of an external beam line for radiobiology experiments and microdosimetry applications at the 18 MeV proton cyclotron facility at CNA* Tesis doct. (Universidad de Sevilla, 2020).
16. Cortés Giraldo, M. A. *Computing and Numerical Methods: Monte Carlo Simulations in Nuclear Physics* Departamento de Física Atómica y Nuclear. Facultad de Física. Universidad de Sevilla. 2023.
17. Rogers, D. Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics. *Physics in Medicine & Biology* **51**, 287 (2006).
18. Herranz Muelas, E. *Simulaciones Monte Carlo para Radioterapia Intraoperatoria con haces de electrones* 2013.
19. Geant4. *A Simulation Toolkit* <https://geant4.web.cern.ch/>. (accessed: 10.06.2023).
20. Cortés Giraldo, M. A. *Computing and Numerical Methods: Introduction to the Geant4 Monte Carlo Toolkit* Departamento de Física Atómica y Nuclear. Facultad de Física. Universidad de Sevilla. 2023.
21. Salvat, F., Fernández-Varea, J. M. y Sempau, J. *PENELOPE. A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. Universitat de Barcelona. 2019.
22. Sempau, J., Fernández-Varea, J., Acosta, E. y Salvat, F. Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **207**, 107-123 (2003).
23. Asai, M., Cortés-Giraldo, M. A., Giménez-Alventosa, V., Giménez Gómez, V. y Salvat, F. The PENELOPE physics models and transport mechanics. Implementation into Geant4. *Frontiers in Physics* **9**, 660 (2021).
24. Desclaux, J. A multiconfiguration relativistic DIRAC-FOCK program. *Computer Physics Communications* **9**, 31-45 (1975).
25. Liljequist, D. A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV-50 keV electrons in solids. *Journal of Physics D: Applied Physics* **16**, 1567 (1983).

26. Seltzer, S. M. y Berger, M. J. Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **12**, 95-134 (1985).
27. Kissel, L., Quarles, C. y Pratt, R. Shape functions for atomic-field bremsstrahlung from electrons of kinetic energy 1–500 keV on selected neutral atoms $1 \leq Z \leq 92$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **28**, 381-460 (1983).
28. Bote, D. y Salvat, F. Calculations of inner-shell ionization by electron impact with the distorted-wave and plane-wave Born approximations. *Phys. Rev. A* **77**, 042701 (2008).
29. Geant4. *Example TestEm12* https://geant4-userdoc.web.cern.ch/Doxygen/examples_doc/html/ExampleTestEm12.html. (accessed: 10.06.2023).
30. Papadimitroulas, P., Loudos, G., Nikiforidis, G. C. y Kagadis, G. C. A dose point kernel database using GATE Monte Carlo simulation toolkit for nuclear medicine applications: comparison with other Monte Carlo codes. *Medical physics* **39**, 5238-5247 (2012).
31. Mendes, B. M. *et al.* Calculation of dose point kernel values for monoenergetic electrons and beta emitting radionuclides: Intercomparison of Monte Carlo codes. *Radiation Physics and Chemistry* **181**, 109327 (2021).
32. Antoni, R. y Bourgois, L. Evaluation of the new electron-transport algorithm in MCNP6. 1 for the simulation of dose point kernel in water. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **412**, 102-108 (2017).
33. Chibani, O. Electron dose distributions from point sources in water, aluminum, iron and lead. *Applied radiation and isotopes* **46**, 1317-1331 (1995).
34. Rohatgi, A. *Webplotdigitizer: Version 4.6* <https://automeris.io/WebPlotDigitizer>. (accessed: 12.06.2023).
35. National Institute of Standards and Technology. *Stopping power and range tables for electrons* <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>. (accessed: 05.05.2023).

Lista de Acrónimos

CSDA *Continuous Slowing Down Approximation.*

DCS *Differential Cross Section* (Sección eficaz diferencial).

DPK *Dose Point Kernels.*

EADL *Evaluated Atomic Data Library.*

EGS *Electron Gamma Shower.*

ETRAN *Electron TRANsport.*

FLUKA *FLUktuierende KAskade.*

GEANT4 *GEometry ANd Tracking.*

ICRU *International Commission on Radiation Units and measurements.*

IGRT *Image-Guided Radiation Therapy* (Radioterapia Guiada por Imágenes).

IMRT *Intensity-Modulated Radiation Therapy* (Radioterapia de Intensidad Modulada).

MT *Multi-Threading.*

NIST *National Institute of Standards and Technology.*

PDF *Probability Density Function* (Función densidad de probabilidad).

PENELOPE *Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons.*

Anexo

A. Macro berger-PenG4.mac

```
1 #
2 # macro for TestEm12 : Dose Point Kernel
3 # using PenG4 code
4 # Seltzer, Appl. Radiat. Isot. 42(1991) page 917
5 # L. Ferrer et al. Cancer Bio. Rad. 22-1 (2007)
6 # Mainegra et al. Med. Phys. 32, 685-699 (2005)
7 #
8 #/control/cout/ignoreThreadsExcept 0
9 /control/verbose 1
10 /run/verbose 1
11 /tracking/verbose 0
12 #
13 # Penelope Material must be defined before issuing /testem/det/setMat
14 #
15 /testem/det/penG4/penMat WATER 278
16 /testem/det/penG4/penMatMSIMPA 1.0e2 1.0e2 1.0e2 0.01 0.01 1.0e2 1.0e2
17 # MSIMPA order: EABS[e] EABS[g] EABS[p] C1 C2 WCC WCR
18 ###/testem/det/penG4/DSMAX 1.0e-3
19 #
20 /testem/det/setMat WATER
21 /testem/det/setRadius 3 cm
22 #
23 /testem/phys/addPhysics emstandard_opt4 # em physics
24 /testem/phys/addPhysics penelope # PenG4 module acts on top of a G4 PL
25 #
26 # PenelopeEMPhysics configuration
27 # Epmax > Beam Emax [e- / gamma]
28 # > 1.21(Emax+me*c^2) [e+]
29 # Ethr <= Epmax
30 #
31 /penEMPhys/Epmax 0.010 MeV
32 /penEMPhys/Ethr 0.010 MeV
33 #
34 # INITIALIZATION
35 #
36 /run/initialize
37 #
```

```
38 /run/setCut 2 um    # This has no effect for PenG4
39 #
40 /gun/particle e-
41 /gun/energy 10 keV
42 #
43 /analysis/setFileName 0010keV_PenG4
44 /analysis/h1/set 8 120 0.0 1.2 none    # normalized edep profile
45 #
46 /run/printProgress 2000
47 /run/beamOn      40000
```