

EL MÉTODO MONTE CARLO EN FÍSICA MÉDICA

Mauro Valente^{†*}

† CONICET & Universidad Nacional de Córdoba; Argentina
† CFIS & Dpto. Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera: Chile.

Primer semestre año académico 2026



Magíster en Física Médica
&
Ingeniería Civil Física
Universidad de La Frontera

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

Prefacio

El presente trabajo *El método Monte Carlo en física médica* es un compendio original de notas elaborado por Mauro Valente en 2026, basado en las ediciones previas de 2017, 2018, 2020, 2021, 2022, 2024 y 2025 para ser utilizado como material de estudio y referencia para el curso electivo de especialización de post-grado *EL MÉTODO MONTE CARLO EN FÍSICA MÉDICA* en el ámbito del Magíster en Física Médica en la Universidad de La Frontera, y como asignatura electiva del programa de Ingeniería Civil Física en la Universidad de La Frontera; Chile.

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

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

Programa y contenido

MÓDULO INICIAL: Rudimentos de FORTRAN77

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

MÓDULO I: Introducción a los Métodos de Monte Carlo

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

MÓDULO II: Repaso sobre estadística y conteo

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

MÓDULO III: Transporte de radiación ionizante

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

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

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

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

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

MÓDULO VI: Simulación Monte Carlo en física médica

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

TRABAJOS PRÁCTICOS ESPECIALES Y ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA

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

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

OVJETIVOS Y METODOLOGÍA DEL TRABAJO

OBJETIVOS

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

Objetivos específicos:

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

METODOLOGÍA DEL TRABAJO

■ CLASES TEÓRICAS

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

■ CLASES DE EJERCITACIÓN PRÁCTICA

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

- **TRABAJOS PRÁCTICOS Y DE LABORATORIO**

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

- **CLASES DE CONSULTA**

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

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA SUGERIDA

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

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

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. *Alpha-emitters dose point kernel in biological tissues for nuclear medicine applications.* Ignacio Scarinci, Mauro Valente, Pedro Pérez. *Radiation Physics and Chemistry* **236**, 2025. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
2. *Novel PENELOPE geometry subroutine for patient-Specific dosimetry in the presence of electromagnetic fields.* A. Gayol, F. Malano, I. Scarinci, P. Pérez, M. Valente. *Radiation Physics and Chemistry* **237**, 2025. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
3. *Fricke gel dosimeter with improved sensitivity for low-dose-level measurements.* Valente M., Molina W., Carrizales Silva L., Figueroa R., Malano F., Pérez P., Santibáñez M & Vedelago J. *Journal of Applied Clinical Medical Physics* **17**(4) pp. 402-417, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
4. *Neutron dose estimation in a zero power nuclear reactor.* Triviño S., Vedelago J., Cantargi F., Keil W., Figueroa R., Mattea F., Chautemps A., Santibáñez, M & Valente M. *Radiation Physics and Chemistry* **127** pp. 62-67, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
5. *Fricke and polymer gel 2D dosimetry validation using Monte Carlo simulation.* Vedelago J., Obando D.C., Malano F., Conejeros R., Figueroa R., García D., González G., Romero M., Santibáñez M., Strumia M.C., Velásquez J., Mattea F. & Valente. *Radiation Measurements* **91** pp. 54-64, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
6. *Analytical and rheological studies of modified gel dosimeters exposed to X-ray beams.* Romero M., Mattea F., Vedelago J., Chacón D., Valente M., Igarzábal Álvarez C. & Strumia M. *Microchemical Journal* **127** pp. 231-236, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
7. *Evaluation of EDXRF configurations to improve the limit of detection and exposure for in vivo quantification of gadolinium in tumor tissue.* Santibáñez, M., Vásquez, M., Figueroa, R.G. & Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **122** pp. 28-34, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
8. *Characterization of the VARIAN PaxScan 2020+ flat panel detector for quantitative X-ray imaging* Geser, F.A., Chacón, D., Figueroa, R., Malano F., Santibáñez, M., Valente, M. *X-Ray Spectrometry* **45** (3) pp. 169-175, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
9. *Characterization of hemispherical area X-ray detector based on set of proportional counters with needle anodes* Figueroa, R.G., Santibáñez, M., Valdés, C.N., Valente, M. *Applied Radiation and Isotopes* **107** pp. 191-194, 2016. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
10. *Optimal configuration for detection of gold nanoparticles in tumors using K_{β} X-ray fluorescence line* Figueroa, R.G., Santibáñez, M., Malano, F., Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **117** pp. 198-202, 2015. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
11. *Polymer gel dosimeter based on itaconic acid* Mattea, F., Chacón, D., Vedelago, J., Valente, M., Strumia, M.C. *Applied Radiation and Isotopes* **105** pp. 98-104, 2015. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
12. *Physical characterization of single convergent beam device for teletherapy: Theoretical and Monte Carlo approach* Figueroa, R.G., Valente, M. *Physics in Medicine and Biology* **60** pp. 7191-7206, 2015. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher
13. *Molecular structure effects on the post irradiation diffusion in polymer gel dosimeters* Mattea, F., Romero, M.R., Vedelago, J., Chacón D., Valente, M., Strumia, M.C. *Applied Radiation and Isotopes* **100** pp. 101-107, 2015. **Get it** @ www.scopus.com or Publisher

14. *Characterization of ferric ions diffusion in Fricke gel dosimeters by using inverse problem techniques* Vedelago, J., Quiroga, A., Valente, M. *Radiation Effects and Defects in Solids* **169** pp. 845-854, 2014. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
15. *Analytical and numerical methods for anatomical and metabolic medical imaging* BC Malano, F., Valente, M. *Medical Imaging: Procedures, Techniques and Applications* pp. 51-81, 2012. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
16. *Calculation of electron and isotopes dose point kernels with fluka Monte Carlo code for dosimetry in nuclear medicine therapy* F. Botta, A. Mairani, G. Battistoni, M. Cremonesi, A. Di Dia, A. Fassó, A. Ferrari, M. Ferrari, G. Paganelli, G. Pedroli, M. Valente *Medical Physics* **38** pp. 3944-3954, 2011. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
17. *Developing and improving a scanning system for dosimetric applications* Pérez, P., Castellano, G., Galván, V., Valente, M. *AIP Conference Proceedings* **1265** pp. 419-422, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
18. *Characterisation of a megavoltage linear accelerator Bremsstrahlung by means of Monte Carlo simulations* Valente, M., Malano, F., Pérez, P., Castro, N., Carrasco, F. *X-Ray Spectrometry* **39** pp. 384-390, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
19. *A computational tool for evaluating the exposure risk in nuclear medicine treatments* Valente, M., Malano, F., Tirao, G. *International Journal of Low Radiation* **7** pp. 333-346, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
20. *3D dose and TCP distribution for radionuclide therapy in nuclear medicine* Valente M., Malano F., Pérez, P. *AIP Conference Proceedings* **1265** pp. 427-430, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
21. *X-ray spectra by means of Monte Carlo simulations for imaging applications* Tirao G., Quintana C., Malano F., Valente, M. *X-Ray Spectrometry* **39** pp. 376-383, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
22. *Mammography image quality optimisation: A Monte Carlo study* Tirao G., Quintana C., Valente, M. *International Journal of Low Radiation* **7** pp. 276-297, 2010. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
23. *Fricke gel dosimeter tissue-equivalence: A Monte Carlo study* Valente, M., Bartesaghi, G., Gambarini, G., Brusa D., Castellano, G., Carrara, M. *Astroparticle, Particle and Space Physics, Detectors and Medical Physics Applications - Proceedings of the 10th Conference* pp. 605-609, 2008. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
24. *Study of polymer gel for dose imaging in radiotherapy* Vanossi, E., Carrara, M., Gambarini, G., Mariani, M., Valente, M. *Radiation Measurements* pp. 442-445, 2008. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
25. *Dose distributions in phantoms irradiated in thermal columns of two different nuclear reactors* Gambarini G., Agosteo S., Altieri S., Bortolussi S., Carrara M., Gay S., Nava E., Petrovich C., Rosi G., Valente M. *Radiation Protection Dosimetry* **126** pp. 640-644, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
26. *Optical analysis of gel dosimeters: Comparison of Fricke and normoxic polymer gels* Gambarini, G., Carrara, M., Mariani, M., Pirola L., Tomatis S., Valente, M., Vanossi, E. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **263** pp. 191-195, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
27. *Gel dosimeters as useful dose and thermal-fluence detectors in boron neutron capture therapy* Moss R., Mariani M., Carrara M., Daquino G. Nievaart V., Valente M., Vanossi E. *Radiation Effects and Defects in Solids* pp. 65-70, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher

28. *An optimized Monte Carlo (PENELOPE) code for the characterization of gel-layer detectors in radiotherapy* Castellano, G., Brusa, D., Carrara, M., Gambarini, G., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 502-505, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
29. *Gel dosimetry measurements and Monte Carlo modeling for external radiotherapy photon beams. Comparison with a treatment planning system dose distribution* Valente M., Aon E., Brunetto M., Castellano G., Gallivanone F., Gambarinia, G. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 497-501, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
30. *Gel-layer dosimetry for dose verification in intensity-modulated radiation therapy* Tomatis, S., Carrara, M., Gambarini, G., Marchesini, R., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **580** pp. 506-509, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
31. *Dose distribution measurements by means of gel-layer dosimeters. Evaluation of algorithms for artifacts amendment* Carrara, M., Gambarini, G., Tomatis, S., Valente, M. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **579** pp. 334-338, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
32. *Preliminary results from a polymer gel dosimeter for absorbed dose imaging in radiotherapy* Mariani, M., Vanossi, E., Gambarini, G., Carrara, M., Valente, M. *Radiation Physics and Chemistry* **76** pp. 1507-1510, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
33. *PhoNeS: A novel approach to BNCT with conventional radiotherapy accelerators* Bevilacqua R., Giannini G., Calligaris F., Fontanarosa D., Longo F., Scian G., Totaro P., Vittor K., Vallazza E., Severgnini M, Vidimari R., Bartesaghi G., Conti V., Mascagna V., Perboni C., Prest M., Gambarini G., Gay S., Valente M., Mozzanica A., Monti A., Ostinelli A., Azariod L, Fidanzio A., Piermattei A., Borla O., Durisic E., Fasolo F., Nastasi U. Perosino E., Zanini A., Tommasino L. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **572** pp. 231-232, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
34. *3D-reconstruction of absorbed dose obtained from gel-dosimeter-layers* Gambarini, G., Carrara, M., Valente, M. *Astroparticle, Particle and Space Physics, Detectors and Medical Physics Applications - Proceedings of the 9th Conference* pp. 705-709, 2007. **Get it @** www.scopus.com or Publisher
35. *Dose imaging in radiotherapy photon fields with Fricke and normoxic-polymer gels* Gambarini, G., Brusa, D., Carrara, M., Castellano G., Valente, M., Vanossi, E. *Journal of Physics: Conference Series* **41** pp. 466-474, 2006. **Get it @** www.scopus.com or Publisher

Índice

0.1..	Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77	13
0.2..	Ejercicios sencillos de aplicación de programación básica en lenguaje FORTRAN 77	13
1..	Módulo I: Introducción a los Métodos Monte Carlo	16
1.1..	Introducción y aspectos básicos	16
1.1.1..	Historia del método Monte Carlo	16
1.1.2..	Definiciones básicas del proceso de simulación Monte Carlo	16
1.1.3..	Definición básica y preliminar del método Monte Carlo	18
1.2..	Generadores de números aleatorios y concepto de aceptación/rechazo	18
1.3..	Convergencia y precisión del método Monte Carlo	20
1.3.1..	El Teorema del límite central	21
1.3.2..	Precisión del método Monte Carlo	22
1.3.3..	Eficiencia del método Monte Carlo	22
1.3.4..	Ejemplos básicos de integración Monte Carlo	23
1.4..	El método Monte Carlo aplicado a la física atómica y de radiaciones	24
1.4.1..	Transporte y colisión modelados por medio del método Monte Carlo	24
1.4.2..	El método Monte Carlo aplicado a la física médica	25
1.5..	Ejercicios sencillos de aplicación integración Monte Carlo	26
2..	Repaso sobre estadística y conteo	28
2.1..	Teoría de distribuciones: formulación y contexto físico	28
2.2..	Variables aleatorias y distribuciones de probabilidad	29
2.2.1..	Distribuciones discretas	29
2.2.2..	Distribuciones continuas	30
2.3..	Números aleatorios y pseudoaleatorios	31
2.4..	Transformación de variables	32
2.5..	Ejercicios sencillos de aplicación de estadística	34
3..	Repaso sobre Interacción radiación-materia	36
3.1..	Radiaciones ionizantes: Repaso	36
3.2..	Repaso sobre la estructura cuántica de la materia	37
3.3..	Interacción entre radiación incidente y centro dispersor: Repaso	40
3.4..	Repaso sobre la sección eficaz	42
3.5..	Ejercicios sencillos de aplicación de transporte e interacción	44

Tabla de Constantes físicas

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

Tabla de Conversión de Unidades dosimétricas

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

MÓDULO INICIAL

Rudimentos básicos del lenguaje FORTRAN 77

Módulo INICIAL: Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77

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

0.1.. Introducción básica al lenguaje FORTRAN 77

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

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

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

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

La figura 1 muestra resultados típicos, obtenidos por los alumnos de la edición 2025 del curso.

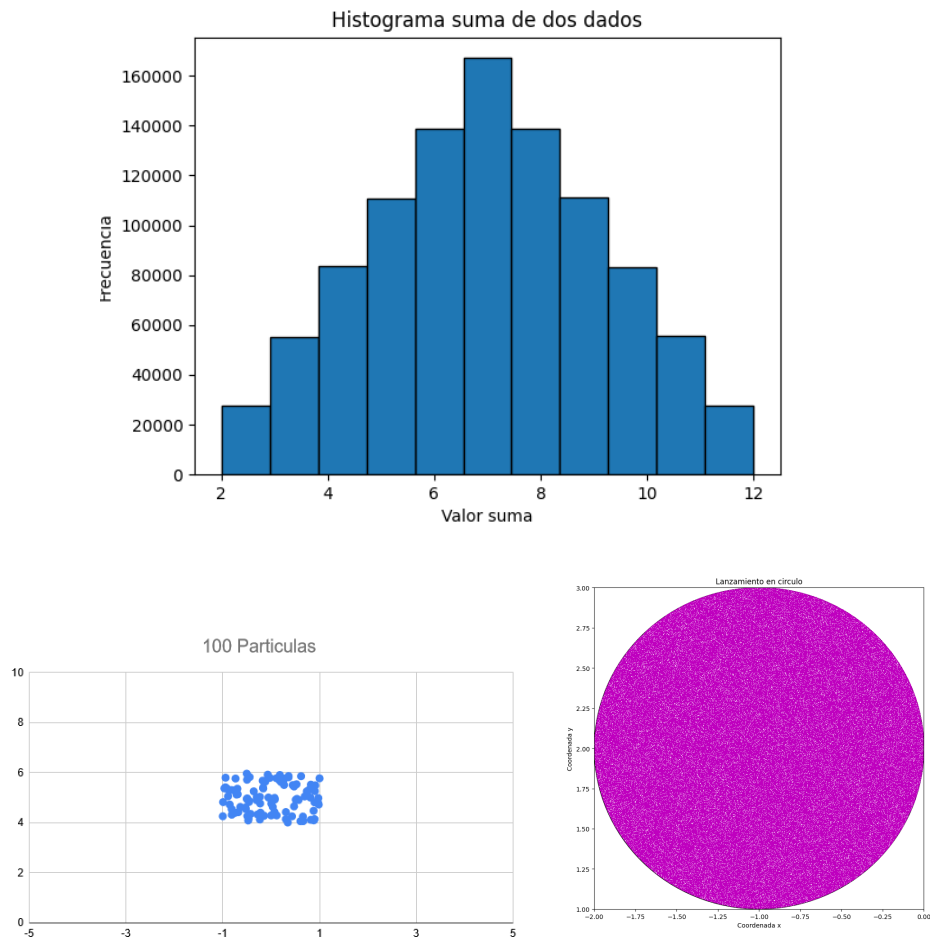


Figura 1. Histograma de la suma del lanzamiento de dos dados (arriba) junto a distribución de posiciones uniformemente distribuidas en un rectángulo (abajo a la izquierda) y en un círculo (abajo a la derecha), obtenidos por los alumnos de la edición 2025.

MÓDULO I

Introducción a los Métodos Monte Carlo

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

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

1.1.. **Introducción y aspectos básicos**

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

1.1.1.. **Historia del método Monte Carlo**

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

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

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

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

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

1.1.2.. **Definiciones básicas del proceso de simulación Monte Carlo**

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

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

Método de simulación

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

Proceso de simulación: etapas

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

Números aleatorios

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

Números Pseudo-aleatorios

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

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

Algoritmos para la generación de números Pseudo-aleatorios

- Métodos de Congruencias:

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

- Método de los centros de cuadrados:

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

- Método de la transformada inversa:

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

1.1.3.. Definición básica y preliminar del método Monte Carlo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3.. Convergencia y precisión del método Monte Carlo

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

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

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

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

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

Teorema

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

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

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

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

Y, la varianza se obtiene de la expresión 8:

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

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

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

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

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

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

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

1.3.1.. El Teorema del límite central

La expresión 12 representa el teorema del límite central:

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

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

Por tanto, se verifica:

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

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

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

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

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

1.3.2.. Precisión del método Monte Carlo

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

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

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

1.3.3.. Eficiencia del método Monte Carlo

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

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

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

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

Cuadro 1. Convergencia de integración numérica.

1.3.4.. Ejemplos básicos de integración Monte Carlo

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

Integración Monte Carlo por transformada inversa

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Integración Monte Carlo por aceptación/rechazo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.4.2.. El método Monte Carlo aplicado a la física médica

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

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

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

1.5.. Ejercicios sencillos de aplicación integración Monte Carlo

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

1. Obtener una serie de números pseudo-aleatorios implementando el método de congruencias en una rutina de FORTRAN 77, y comparar los resultados para los casos de diez y de mil números con los obtenidos medio de la función/paquete *rand* de MatLab, graficando ambos histogramas de frecuencias.
2. Suponiendo que se dispone de un sistema de cómputo que requiere, en promedio 1 s por operación, estimar el tiempo total de cómputo necesario por parte del método Monte Carlo, para estimar la integral numérica del flujo estacionario de fotones $\Psi(x, y, z, E)$ en un problema específico si se conoce que la regla de Simpson emplea 1 hora para alcanzar la convergencia, y demanda 10 operaciones por cada elemento del espacio muestral, y se presume que Monte Carlo también requiere de 10 operaciones por cada elemento del espacio muestral.
3. Estimar el valor del número π mediante dos métodos Monte Carlo: i) El método de Buffon² y 2) El método geométrico basado en el cociente de áreas (círculo/cuadrado). Implementar el procedimiento en F77 para diferente cantidad de iteraciones (eventos), visualizar y comparar los resultados obtenidos.
4. Realizar una rutina para estimar la integral numérica $\int_1^2 e^{\frac{z}{2}} dz$, y comparar el valor numérico obtenido para un espacio muestral de $N = 1000$ con la solución analítica exacta.
5. Desarrollar una rutina para estimar, utilizando el método de la aceptación y rechazo, la integral definida $\int_{-1}^1 (1 + x^2) dx$ visualizando gráficamente los resultados para un espacio muestral de mil y de 100 mil; y comparar con el resultado exacto obtenido por método analítico.

²Hint: Lanzar N varas de longitud l sobre un plano con líneas paralelas separadas por distancia L y estimar π usando: $\pi \approx (2 \cdot l \cdot N) / (L \cdot C)$, donde C es el número de cruces. Probar con: $L = 1, l = 1$ y $N = 10^6$.

MÓDULO II

Repaso sobre estadística y conteo

2.. Repaso sobre estadística y conteo

El presente capítulo tiene como objetivo establecer los fundamentos de estadística y teoría de probabilidades necesarios para el desarrollo y comprensión rigurosa de los métodos de simulación Monte Carlo aplicados a la física médica, en particular al transporte de radiación.

A diferencia de un tratamiento introductorio, se enfatiza aquí la formulación matemática precisa y su interpretación física en problemas típicos tales como transporte de partículas, dosimetría y detección.

2.1.. Teoría de distribuciones: formulación y contexto físico

El desarrollo del análisis funcional entre los siglos XIX y XX condujo a la introducción de las denominadas *funciones generalizadas* o distribuciones, motivadas en gran medida por problemas físicos donde las descripciones clásicas resultaban insuficientes.

Un ejemplo paradigmático es la ecuación de ondas (problema de la cuerda vibrante) formulada por d'Alembert, que conduce naturalmente a soluciones en el sentido de distribuciones.

Desde el punto de vista físico, muchas magnitudes relevantes no pueden describirse mediante funciones ordinarias. Por ejemplo, una distribución puntual de masa, carga o energía no puede representarse mediante una densidad clásica.

Sea $m(\vec{r})$ la densidad de masa en una región del espacio. La masa total se define como:

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

Sin embargo, si la masa está concentrada en un punto (por ejemplo, interacción puntual de una partícula o depósito localizado de energía en dosimetría), se requiere la *delta de Dirac*, definida por:

$$\delta(x) = 0 \quad \forall x \neq 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (22)$$

En transporte de radiación, la función delta aparece naturalmente al modelar fuentes monoenergéticas, por ejemplo:

$$\psi(E) = \delta(E - E_0)$$

que representa un haz de partículas con energía bien definida E_0 .

La teoría de distribuciones se formaliza en espacios funcionales (espacios de Lebesgue L^p y sus duales), lo que permite tratar rigurosamente magnitudes físicas medibles y operadores asociados (como operadores de transporte).

2.2.. Variables aleatorias y distribuciones de probabilidad

Sea (Ω, \mathcal{F}, P) un espacio de probabilidad. Una *variable aleatoria* es una función medible:

$$X : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad (23)$$

tal que, para todo $x \in \mathbb{R}$:

$$P(X \leq x) = P(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \leq x\})$$

define una función de distribución acumulada (FDA).

En el contexto de física médica, ejemplos típicos de variables aleatorias incluyen:

- Energía depositada por una partícula en un voxel
- Número de interacciones en un medio
- Longitud libre media entre colisiones
- ángulo de dispersión

Dependiendo de su naturaleza, las variables pueden ser discretas o continuas.

2.2.1.. Distribuciones discretas

Distribución uniforme discreta Describe una variable que toma valores finitos con igual probabilidad:

$$P(X = x_i) = \frac{1}{n}$$

En simulaciones Monte Carlo, aparece en la selección equiprobable de estados discretos, por ejemplo, elección de dirección entre un conjunto finito de ángulos discretizados.

Distribución binomial Sea $X \sim Bin(n, p)$, entonces:

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

donde: $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$.

En física de radiaciones, modela procesos donde se cuentan eventos independientes, por ejemplo:

- Número de fotones que interactúan en un detector
- Número de eventos de absorción en un conjunto de partículas incidentes

Distribución de Poisson Es fundamental en física de radiaciones. Se define como:

$$P(X = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$$

donde λ es el valor esperado.

Aparece naturalmente en:

- Conteo de partículas detectadas en un intervalo de tiempo
- Emisión radiactiva (desintegraciones nucleares)
- Estadística de conteo en detectores

Es el modelo fundamental del ruido cuántico en sistemas de detección.

Distribución geométrica Modela el número de ensayos hasta el primer éxito:

$$P(X = k) = (1 - p)^{k-1} p$$

En transporte de radiación, está relacionada conceptualmente con procesos de tipo "hasta la primera interacción".

2.2.2.. Distribuciones continuas

Distribución uniforme

$$f(x) = \frac{1}{b-a}, \quad x \in (a, b)$$

Es la base de todos los métodos Monte Carlo, ya que cualquier distribución puede generarse a partir de variables uniformes mediante transformaciones.

Distribución exponencial

$$f(x) = \mu e^{-\mu x}, \quad x \geq 0$$

Tiene una interpretación física directa en transporte de radiación:

- Describe la longitud libre media entre interacciones
- μ es el coeficiente de atenuación lineal

Es esencial en la simulación de trayectorias de partículas.

Distribución normal (Gaussiana)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Surge como consecuencia del teorema del límite central.

Aplicaciones en física médica:

- Propagación de errores
- Ruido electrónico en detectores
- Aproximación de distribuciones complejas

Distribución gamma Generaliza la exponencial:

$$f(x) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\beta x}$$

Aparece en:

- Suma de variables exponenciales (tiempos entre múltiples interacciones)
- Modelos de transporte acumulativo de energía

2.3.. Números aleatorios y pseudoaleatorios

La simulación Monte Carlo requiere la generación de secuencias $\{u_i\}_{i=1}^N$ de variables independientes uniformes en $(0, 1)$.

Números aleatorios verdaderos Se obtienen a partir de procesos físicos intrínsecamente aleatorios, tales como:

- Decaimiento radiactivo
- Ruido térmico
- Procesos cuánticos

Números pseudoaleatorios Son generados mediante algoritmos determinísticos:

- Estado inicial definido por una semilla
- Regla de transición (recurrencia)
- Función de salida

Un ejemplo clásico es el generador congruencial lineal:

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \text{ mód } m$$

La calidad del generador es crítica en simulaciones de transporte de radiación, ya que correlaciones espurias pueden introducir sesgos en magnitudes físicas estimadas (por ejemplo, dosis absorbida).

2.4.. Transformación de variables

Sea $U \sim U(0, 1)$, y F_X la función de distribución de una variable X . Entonces:

$$X = F_X^{-1}(U)$$

tiene distribución F_X .

Este resultado constituye la base del método de transformación inversa, ampliamente utilizado en simulación Monte Carlo para generar variables con distribuciones físicas específicas (por ejemplo, longitudes libres, energías, ángulos de dispersión).

Camino libre medio en transporte de neutrones En transporte de neutrones en un medio homogéneo, la distancia s hasta la próxima interacción sigue una distribución exponencial:

$$f(s) = \Sigma_t e^{-\Sigma_t s}, \quad s \geq 0$$

donde Σ_t es la sección eficaz macroscópica total del medio.

La función de distribución acumulada es:

$$F(s) = 1 - e^{-\Sigma_t s}$$

Aplicando el método de transformación inversa, sea $U \sim U(0, 1)$:

$$U = 1 - e^{-\Sigma_t s}$$

Despejando:

$$s = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - U)$$

Dado que $1 - U \sim U(0, 1)$, resulta:

$$s = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln U$$

Esta expresión constituye la base del muestreo de trayectorias en códigos de transporte de neutrones, permitiendo simular la propagación estocástica de partículas en medios materiales.

Muestreo de energía en haces de fotones En ciertos modelos simplificados de haces fotónicos (por ejemplo, en radioterapia), la distribución de energías puede aproximarse mediante una ley exponencial truncada:

$$f(E) = \frac{\lambda e^{-\lambda E}}{1 - e^{-\lambda E_{\text{máx}}}}, \quad 0 \leq E \leq E_{\text{máx}}$$

La función de distribución acumulada es:

$$F(E) = \frac{1 - e^{-\lambda E}}{1 - e^{-\lambda E_{\text{máx}}}}$$

Sea $U \sim U(0, 1)$:

$$U = \frac{1 - e^{-\lambda E}}{1 - e^{-\lambda E_{\text{máx}}}}$$

Despejando:

$$E = -\frac{1}{\lambda} \ln \left(1 - U(1 - e^{-\lambda E_{\text{máx}}}) \right)$$

Este tipo de muestreo es relevante en simulaciones Monte Carlo de haces terapéuticos, donde resulta necesario reproducir distribuciones espectrales de energía para estimar magnitudes dosimétricas como la dosis absorbida en tejidos.

2.5.. Ejercicios sencillos de aplicación de estadística

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

1. Proponer un ejemplo de una situación realista en el que se manifieste la distribución discreta uniforme, generar el conjunto de resultados y obtener la visualización gráfica donde se aprecien las propiedades básicas de la distribución.
2. Estimar la masa total de una distribución bidimensional de densidad uniforme $\rho = 1 \text{ g cm}^{-2}$ de un objeto que se extiende entre $[-2, 2]$ en el eje horizontal y entre $[5, 7]$ en el eje vertical.
3. Utilizar una regla para medir uno de los lados del propio teléfono celular. Repetir la operación 100 veces y analizar la distribución de los resultados obtenidos. Se trata de una variable discreta o continua? Qué tipo de distribución sigue el conjunto de resultados obtenido?
4. Comparar una distribución (continua) normal con una de Poisson. Estimar valores para los parámetros de modo que las distribuciones presenten valor medio similar. Generar la visualización correspondiente y analizar diferencias y similitudes.
5. Distribución gamma y procesos de interacción múltiple: Considerar la suma de n longitudes libres independientes.
 - Demostrar que la variable resultante sigue una distribución gamma.
 - Generar muestras mediante simulación en MATLAB o Fortran 77.
 - Analizar la distribución resultante para distintos valores de n .
 - Interpretar el resultado en términos de profundidad de penetración.
6. Distribución angular y muestreo en el espacio de direcciones: En algunas situaciones de transporte de radiación, la dirección de emisión es isotrópica.
 - Generar direcciones aleatorias uniformemente distribuidas sobre la esfera.
 - Verificar la uniformidad en $\cos \theta$ y ϕ .
 - Implementar la simulación en MATLAB o Fortran 77.
 - Visualizar la distribución angular.
7. Distribución lognormal en deposición de energía: En ciertos medios heterogéneos, la energía depositada por parte de la radiación ionizante puede modelarse mediante una distribución lognormal.
 - Generar una variable lognormal a partir de una normal.
 - Simular depósitos de energía en un volumen.
 - Analizar la asimetría de la distribución.
 - Discutir su relevancia en microdosimetría.

MÓDULO III

Repaso sobre interacción radiación-materia

3.. Repaso sobre Interacción radiación-materia

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

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

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

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

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

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

Sin embargo, para realizar los cálculos es conveniente emplear el sistema de unidades atómicas³.

3.1.. Radiaciones ionizantes: Repaso

Las radiaciones ionizantes se clasifican atendiendo en primer lugar a la carga eléctrica de las partículas (neutras o cargadas). La segunda característica relevante es la masa de las mismas, de acuerdo con el esquema de la figura 2.

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

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

³Las unidades atómicas se definen tomando: $q_e = m_e = \hbar = 1$.

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

Figura 2. Cuadro de clasificación de radiaciones ionizantes.

3.2.. Repaso sobre la estructura cuántica de la materia

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger radial también posee soluciones con autovalores positivos, que describen partículas libres con energía cinética no-relativista

$\varepsilon = \frac{1}{2}Mv^2$ (espectro continuo). La normalización de las funciones del continuo $u_{\varepsilon,\ell}(r)$ es arbitraria. Además, las $u_{\varepsilon,\ell}(r)$ presentan un comportamiento asintótico del tipo:

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

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

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

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

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

La ecuación de Dirac independiente del tiempo es:

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

donde $\vec{\alpha}$ y β son las matrices de Dirac. Los autovalores y funciones de onda radiales reducidas se denominan según el número cuántico de momento angular relativista $\kappa \equiv (\ell - j)(2j + 1)$ para $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Las soluciones a esta ecuación pueden encontrarse en literatura especializada⁴.

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

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

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

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

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

⁴No hace al contenido del presente curso.

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

Luego:

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

O bien, la formulación correspondiente en el límite relativista:

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

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

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

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

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

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

Una peculiaridad interesante de los potenciales autoconsistentes tipo Dirac-Hartree-Fock-Slater es que: $|\epsilon_{n,\kappa}| \approx U_{n,\kappa}$. La Figura 1 muestra la energía de ligadura experimental $U_{n\kappa}$ de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros, y las correspondientes predicciones teóricas $|\epsilon_{n,\kappa}|$ de la mecánica cuántica en el tratamiento de sistemas multielectrónicos.

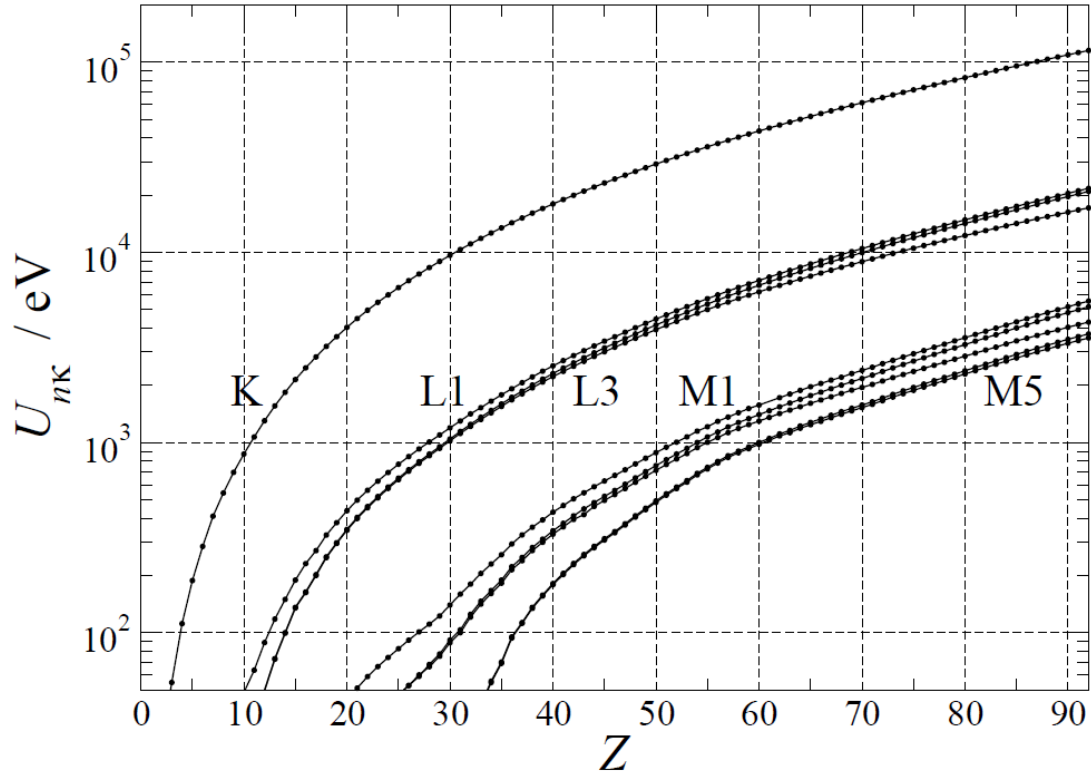


Figura 3. Energías de ionización experimentales (puntos) de las capas K , $L1 - L3$ y $M1 - M5$ de los átomos neutros y predicciones teóricas (líneas continuas) [F. Salvat & J.M. Fernández-Varea].

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

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

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

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

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

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

es el Hamiltoniano del campo de “fotones libres”.

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

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

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

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

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

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

Efectuando el acoplamiento mínimo en la ecuación 34 se obtiene:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.4.. Repaso sobre la sección eficaz

Considérese un experimento de *scattering* (dispersión), en el que se hace incidir sobre un blanco una densidad de flujo (tasa de fluencia) de partículas $\dot{\Phi}$.

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

$$\frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \equiv \frac{1}{\dot{\Phi}} \frac{\dot{N}}{dE' d\Omega} \quad (47)$$

En la expresión anterior (47) el último factor está directamente relacionado con la probabilidad de transición por unidad de tiempo dada por la regla de oro de Fermi (45).

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

$$\sigma = \int dE' \int d\Omega \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (48)$$

que tiene dimensiones de superficie.

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

$$p(E', \theta) = \frac{1}{\sigma} 2\pi \sin(\theta) \frac{d^2\sigma}{dE' d\Omega} \quad (49)$$

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

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

$$\lambda^{-1} = \mathcal{N}\sigma \quad (50)$$

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

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

Así, se tiene:

$$\sigma_{Total} = \sum_i \sigma_i \quad \wedge \quad \lambda_{Total}^{-1} = \sum_i \lambda_i^{-1} \quad (51)$$

3.5.. Ejercicios sencillos de aplicación de transporte e interacción

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

- 1 Simular el transporte de partículas (proyectiles primarios) en un medio homogéneo, considerando dos eventos de interacción: absorción (20 % de probabilidad) y dispersión inelástica (80 % de probabilidad). La función de pérdida de energía (cinética) E en la dispersión inelástica se modela como $f(E)$ y suponga, a modo de ejemplo, $f(E) = E/2$, es decir, la partícula pierde la mitad de su energía cinética en cada interacción.
 - Estimar la distribución de distancia total y distancia neta recorrida antes de la absorción para partículas primarias de energía $E_0 = 1$ MeV.
 - Estimar la distribución de caminos libres medios.
 - Estimar la distribución de la cantidad de colisiones (interacciones) totales por primario.
- 2 Resolver la ecuación de Schrödinger para un Potencial de Pozo Cuadrado: Implementar un asbordaje por medio del método Monte Carlo para estimar la energía del estado fundamental (autovalor) y la función de onda (autofunción) para un electrón sometido a la interacción correspondiente a un potencial *de pozo cuadrado* unidimensional, definido por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -L/2 \leq x \leq L/2 \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde L es el ancho del pozo. Aplicar el procedimiento al caso en que los parámetros del problema son:

- $L = 10 \text{ \AA}$ (ancho del pozo)
 - $m = 1$ (masa del electrón en unidades atómicas)
 - $\hbar = 1$ (constante de Planck reducida en unidades atómicas)
- 3 Interacción de partículas con la materia: Utilizando el método de Monte Carlo, simular la interacción de partículas (fotones) con un material (agua) considerando 3 mecanismos de interacción: elástico (Rayleigh), Compton y fotoeléctrico. Las secciones eficaces microscópicas para cada mecanismo de interacción son:

- Elástico: $\sigma_1(E) = \frac{\sigma_0}{E^2}$
- Compton: $\sigma_2(E) = \frac{\sigma_0}{E} \left(1 + \frac{E}{m_e c^2}\right)^{-1}$
- Fotoeléctrico: $\sigma_3(E) = \frac{\sigma_0}{E^3} \left(1 - \frac{E}{m_e c^2}\right)^{-1}$

donde σ_0 es una constante, E es la energía cinética del fotón, m_e es la masa en reposo del electrón y c es la velocidad de la luz en el vacío. Proceder para:

- Calcular la sección eficaz macroscópica $\Sigma_i(E)$ para cada i -mecanismo de interacción.

- Simular la interacción de 10 mil fotones con energía inicial de 1 MeV con el material (agua).
- Estimar la distribución de la energía de los fotones después de la interacción.
- Estimar la probabilidad de absorción de los fotones en el material.

Referencias

- [1] J. García Quesada. *Manual de FORTRAN 77*, 2000.
- [2] M. Valente. *Fundamentos de física médica* Ed. 2020, LIIFAMIR^X - FAMAFA, Universidad Nacional de Cíotdoba; Argentina, 2020.
- [3] I. Bankman. *Handbook of medical image processing and analysis*. Elsevier Academic Press, California, 2009.
- [4] Seibert A. Leidholt E. Boone J. Bushberg, J. *The essential physics of medical imaging*. Lippincot Williams and Wilkins, 2001.
- [5] T. Buzug. *Computed Tomography*. Springer-Verlag, 2008.
- [6] P. Suetens. *Fundamentals of Medical Imaging*. Cambridge University Press, second edition, 2009.
- [7] P. Duvauchelle, N. Freud, V. Kaftandjian, and D. Babot. A computer code to simulate x-ray imaging techniques. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, (170):245–258, 2000.
- [8] S. España, J. L. Herraiz, E. Vicente, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. M. Udías. Penelopet, a monte carlo pet simulation tool based on penelope: features and validation. *Phys. Med. Biol.*, (54):1723–1742, 2009.
- [9] G. Tirao, C. Quintana, and M. Valente. Mammography image quality optimisation: a monte carlo study. *Int. J. Low Radiation*, 7(4):276–297, 2010.
- [10] C. Epstein. *Introduction to the mathematics of medical imaging*. Siam, Philadelphia, 2003.
- [11] G. Saha. *Physics and radiobiology of nuclear medicine*. Springer-Verlag, 2006.
- [12] J.M. Fernández-Varea, J. empau and F. Salvat, S.; Fernández-Varea. *PENELOPE-2008: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. Nuclear Energy Agency, Barcelona, Spain, 2009.
- [13] F.H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley-VCH, 1987.
- [14] S Dupree and S. Fraley. *A Monte Carlo premier*. Kluver-Plenum, New York., 2002.
- [15] P. Bevington and D. Keith Robinson. *Data reduction and error analysis*. McGraw Hill, 2003.
- [16] H. Tijms. *Understanding Probability: Chance Rules in Everyday Life*. Cambridge University Press, 2004.
- [17] M. Ljungberg, S. Strand, and M. King, editors. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in diagnostic imaging*. Institute of Physics Publishing, 1998.
- [18] J. Ducote and S. Molloi. Scatter correction in digital mammography based on image deconvolution. *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 55(No. 5):1295–1309, March 2010.

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