

Simulación Monte Carlo: Aplicación a la dosimetría de radiaciones

Gustavo Castellano

Facultad de Matemática, Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba - Argentina

Montevideo - Noviembre de 2006

Contenidos

- Nociones básicas para la simulación Monte Carlo.
Elementos de teoría de probabilidades.
- Simulación del transporte de radiación.
Programa PENELOPE.

Bibliografía:

PENELOPE - A code system for Monte Carlo simulation.

F. Salvat, J. Fernández-Varea, E. Acosta y J. Sempau (2001).

<http://www.nea.fr/abs/html/nea-1525.html>

energy = 6.70E+0

electron —————
photon —————
positron —————

material: WATER, LIQUID

PHI = 0 deg
thickness = 5.00E-01 cm

Simulación Monte Carlo → “cascada”

Simulación Monte Carlo $\longrightarrow$ Números al azar



Variables aleatorias $\longleftrightarrow$ Probabilidad

(*expectativa* respecto del resultado
de un experimento o evento)

M posibilidades, n favorables: $p(x) = \frac{n}{M}$ ($M \rightarrow \infty$)

x continua $\longrightarrow$ *densidad de probabilidad* $p(x)$

$p(x) \, dx$: probabilidad de observar resultados entre x y $x + dx$

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b dx \, p(x)$$

[En realidad, *cualquier* variable aleatoria puede considerarse como *continua*:

$$p(x) = \sum_i p_i \, \delta(x - x_i)]$$

Densidad de probabilidad

- $p(x) \geq 0$
- $\int dx p(x) = 1$ (normalización)

► Cualquier función que satisfaga estas condiciones puede interpretarse como distribución de probabilidad.

$$\mathcal{P}(x) \equiv \int_{x_{\min}}^x dx' p(x') \quad \text{probabilidad acumulativa}$$

$$\text{monótonamente creciente: } p(x) = \frac{d}{dx} \mathcal{P}(x) \geq 0$$

$$\mathcal{P}(x_{\min}) = 0 \quad ; \quad \mathcal{P}(x_{\max}) = 1$$

$$\langle x^n \rangle = \int dx x^n p(x) \quad \text{momento } n\text{-ésimo}$$

(algunos momentos podrían no existir!)

$$\langle x \rangle = \int dx x p(x) \quad \text{valor medio (esperado)}$$

$$\text{var}(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad \text{varianza}$$

$$\sigma = \sqrt{\text{var}(x)} \quad \text{desviación estándar}$$

$$\rightarrow \langle f \rangle = \int dx f(x) p(x) \quad \text{y} \quad \text{var}[f(x)] = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

(f : variable aleatoria)

Varias variables

$$x, y \rightarrow \text{probabilidad conjunta } p(x, y) \quad \left\{ \begin{array}{l} p(x, y) \geq 0 \\ \iint dx \, dy \, p(x, y) = 1 \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{array}{l} q(x) = \int dy \, p(x, y) \\ q(y) = \int dx \, p(x, y) \end{array} \right\} \text{probabilidades marginales}$$

$$\langle f(x, y) \rangle = \iint dx \, dy \, f(x, y) \, p(x, y)$$

Correlación entre variables aleatorias

$$\text{cov}(x, y) = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle \quad \text{covarianza}$$

$$\text{cor}(x, y) = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x \sigma_y} \quad \text{correlación (adimensional)}$$

$$\star \quad -1 \leq \text{cor}(x, y) \leq 1$$

$$\star \quad \text{cor}(x, x) = 1; \quad \text{cor}(x, -x) = -1$$

$$x, y \text{ independientes} \rightarrow p(x, y) = p_x(x) \cdot p_y(y) \quad \text{y} \quad \text{cov}(x, y) = 0$$

Generación de números al azar

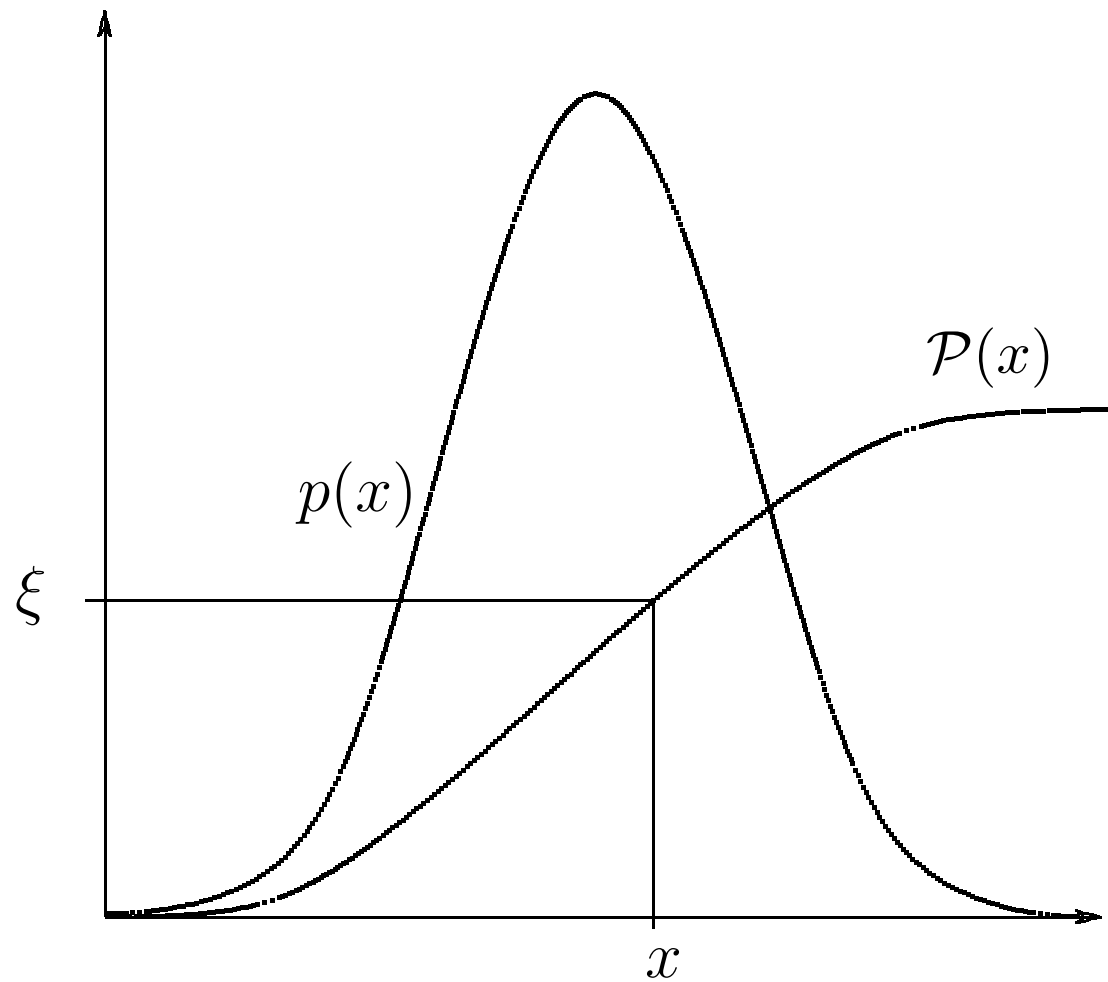
ξ distribuida uniformemente en $(0,1)$

algoritmos $\rightarrow$ números *seudo aleatorios* (32 bits, período 13^{18})

Método de la **transformada inversa**: $\xi = \mathcal{P}(x) \left(\equiv \int_{x_{\text{mín}}}^x dx' p(x') \right)$

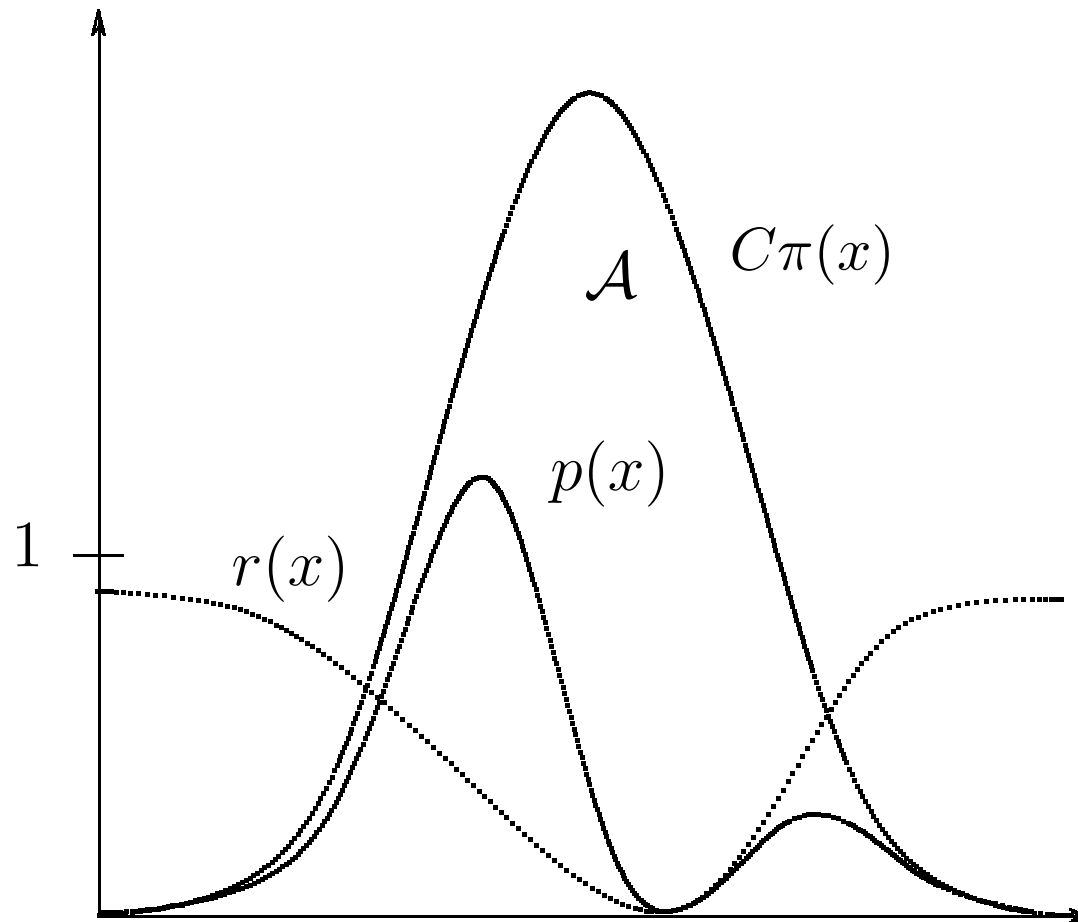
$$\pi(\xi) d\xi = p(x) dx \quad \Rightarrow \quad \pi(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = 1 \quad \left(\xi \text{ uniforme en } (0,1) \right)$$

Método de la transformada inversa



ξ uniforme $\rightarrow x$ según $p(x) = \frac{d\xi}{dx}$

Métodos de rechazo de variables



$$p(x) = C \pi(x) r(x)$$

Muestreo de muchas variables

probabilidades marginales

probabilidades condicionales



$$q(x) = \int dy \, p(x, y)$$

$$p(x|y) = \frac{p(x, y)}{q(y)}$$



distribución de probabilidades

muestreo de **una** variable



métodos de composición

Simulación del transporte de radiación $\longrightarrow$ modelos de dispersión

sección eficaz diferencial $\longrightarrow$ distribución de probabilidades

Ejemplo: dos mecanismos A y B con pérdida de energía W y deflexión θ

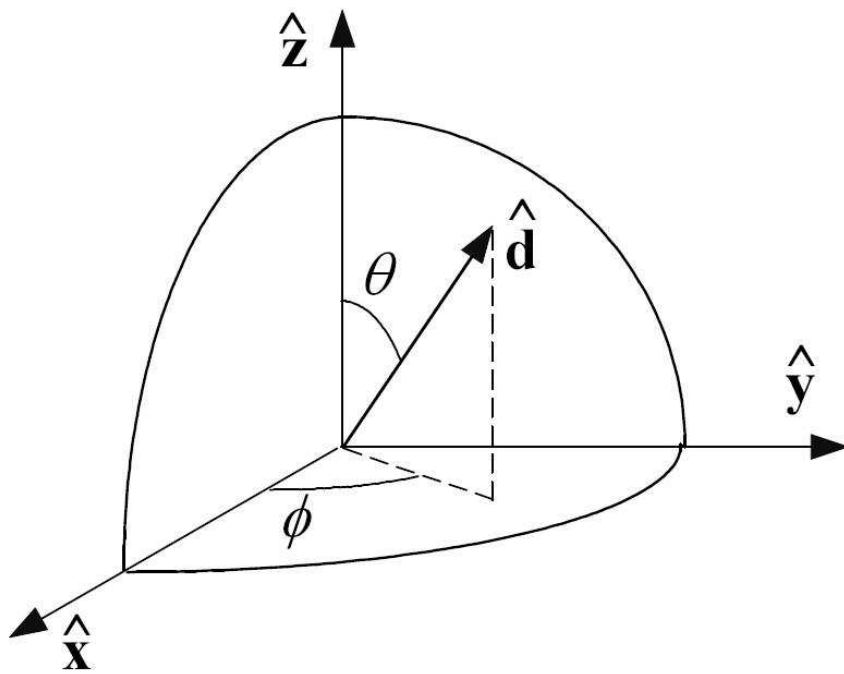
$$\frac{d^2\sigma_A}{dW d\Omega} \quad , \quad \frac{d^2\sigma_B}{dW d\Omega}$$

normalización mediante secciones eficaces totales $\sigma_{A,B} = \int \frac{d^2\sigma_{A,B}}{dW d\Omega}$

$$p_{A,B} = \frac{\sigma_{A,B}}{\sigma_A + \sigma_B}$$

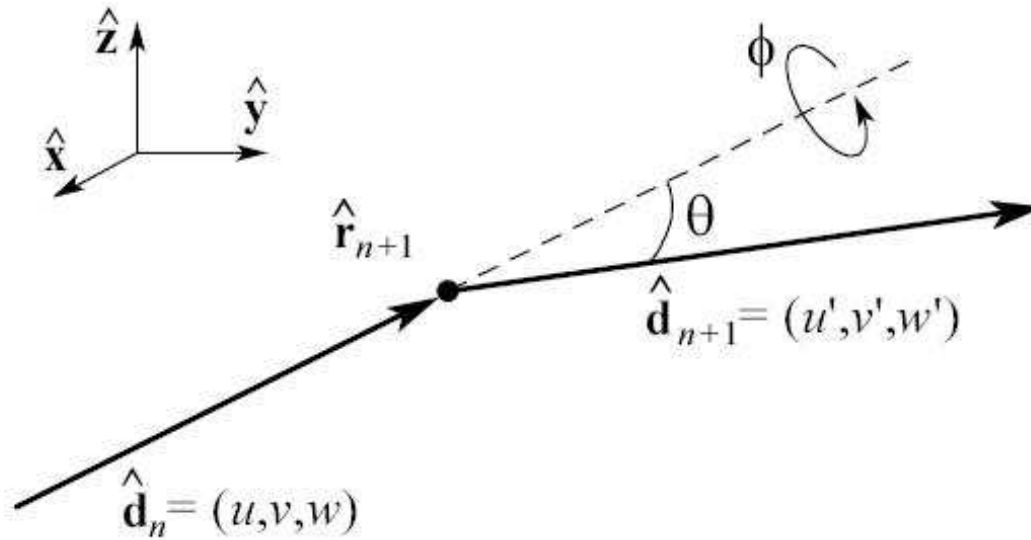
(sólo para medios amorfos, no se involucran efectos ‘coherentes’)

Generación de trayectorias aleatorias



Coordenadas polares

Generación de trayectorias aleatorias



Cantidad de interés: energía depositada, ionizaciones, retrodispersión,

etc. $\rightarrow$ variable aleatoria

¿Estimaciones?

Estimación: $\bar{q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad \rightarrow \quad \int dx \, q(x) p(x) = \langle q \rangle \quad (N \rightarrow \infty)$

$$\text{var} (q) = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \bar{q}^2 \right] \quad (N \rightarrow \infty)$$

$$\langle \bar{q} \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle q \rangle = \langle q \rangle$$

$$\text{var} (\bar{q}) = \text{var} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \right] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{var} (q) = \frac{1}{N} \text{var} (q)$$

$$\sigma(\bar{q}) = \frac{\sigma(q)}{\sqrt{N}}$$

$$\text{var}(\bar{q}) = \text{var}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i\right] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{var}(q) = \frac{1}{N} \text{var}(q)$$

$$\sigma(\bar{q}) = \frac{\sigma(q)}{\sqrt{N}}$$

$$\sigma/M \Rightarrow N * M^2 !!!$$

Reducción de varianza: privilegiar algunas interacciones, descartando otras
(aprovechando tiempo de simulación)

- Splitting
- Russian roulette
- Interaction forcing
- ...

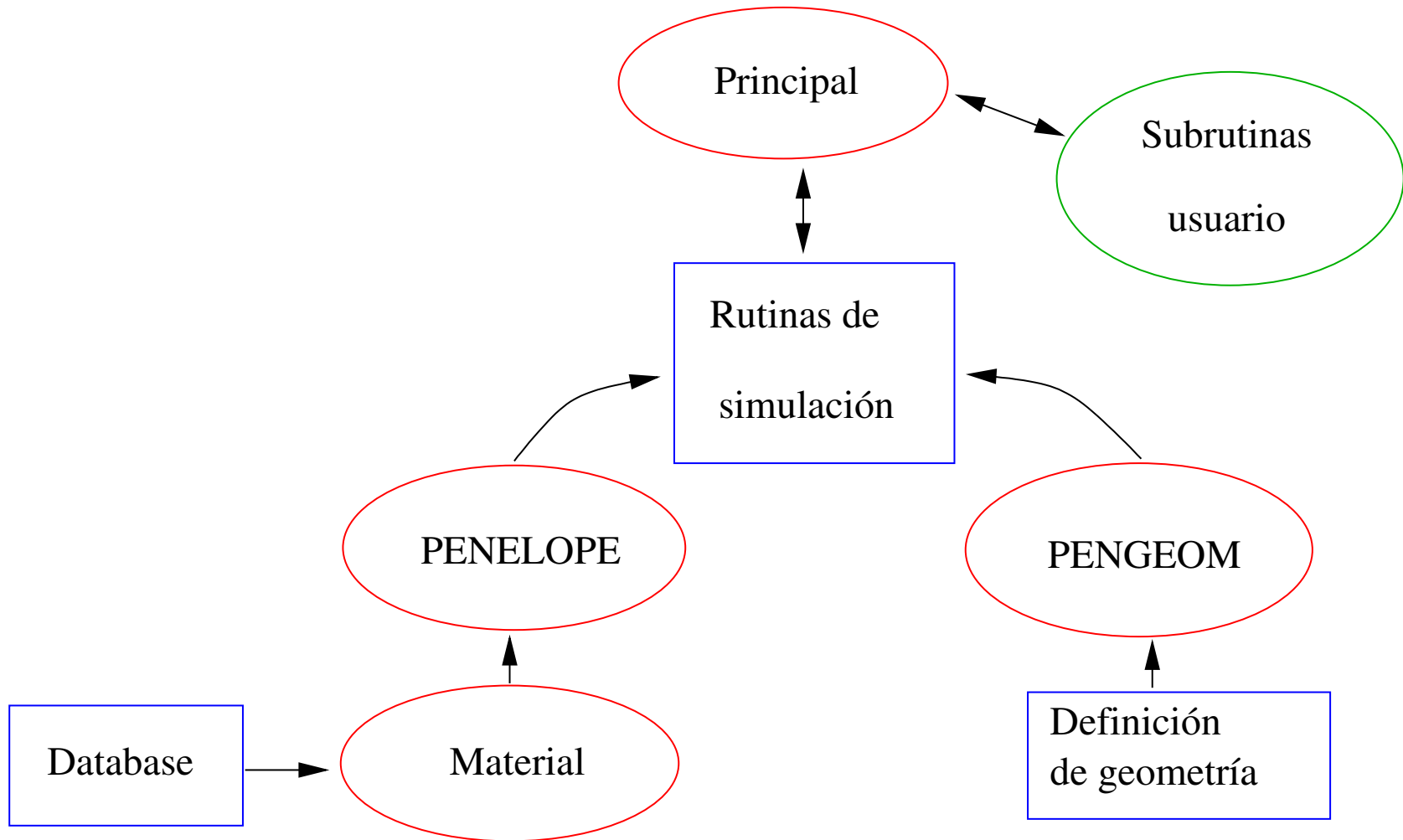
Subrutinas PENELOPE

- PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons (luego se incorporan fotones)
- fotones → simulación *detallada*
electrones-positrones → simulación *mixta*
- partículas secundarias (cronológicamente)
- 100 eV – 1 GeV
- cuatro bloques:
 - ★ Inicialización - Entrada de datos
 - ★ Simulación de interacciones
 - ★ Rutinas numéricas
 - ★ Transporte de radiación

PENELOPE - A code system for Monte Carlo simulation. F. Salvat, J. Fernández-Varea, E. Acosta y J. Sempau (2001).

<http://www.nea.fr/abs/html/nea-1525.html>

Programa de simulación:



PDCOMPOS.TAB

- Composición, densidad, energía media de excitación para 279 materiales
- Primeros 98: materiales puros (números atómicos) (PENELOPE no funciona para $Z > 92$)
- 99 – 279: mezclas y compuestos, en orden alfabético
- Listados en PDEFLIST.TAB

Ejemplos: PENSLAB, PENCYL, PENDOSES

Interacciones de fotones

- Coherent (Rayleigh)
- Efecto fotoeléctrico
- Dispersión Compton (inelástica)
- Producción de pares electrón-positrón

→ Relajación atómica

Interacciones de electrones y positrones

- Colisiones elásticas
- Colisiones inelásticas
 - colisiones inelásticas “duras”
- Emisión de Bremsstrahlung
 - eventos radiativos “duros”
- Aniquilación de positrones

→ Relajación atómica

Transporte de electrones/positrones

Esquema de simulación “mixta”:

- Teoría de dispersión múltiple

Multiple elastic scattering theory

- Pérdidas leves de energía

- Colisiones inelásticas “duras”

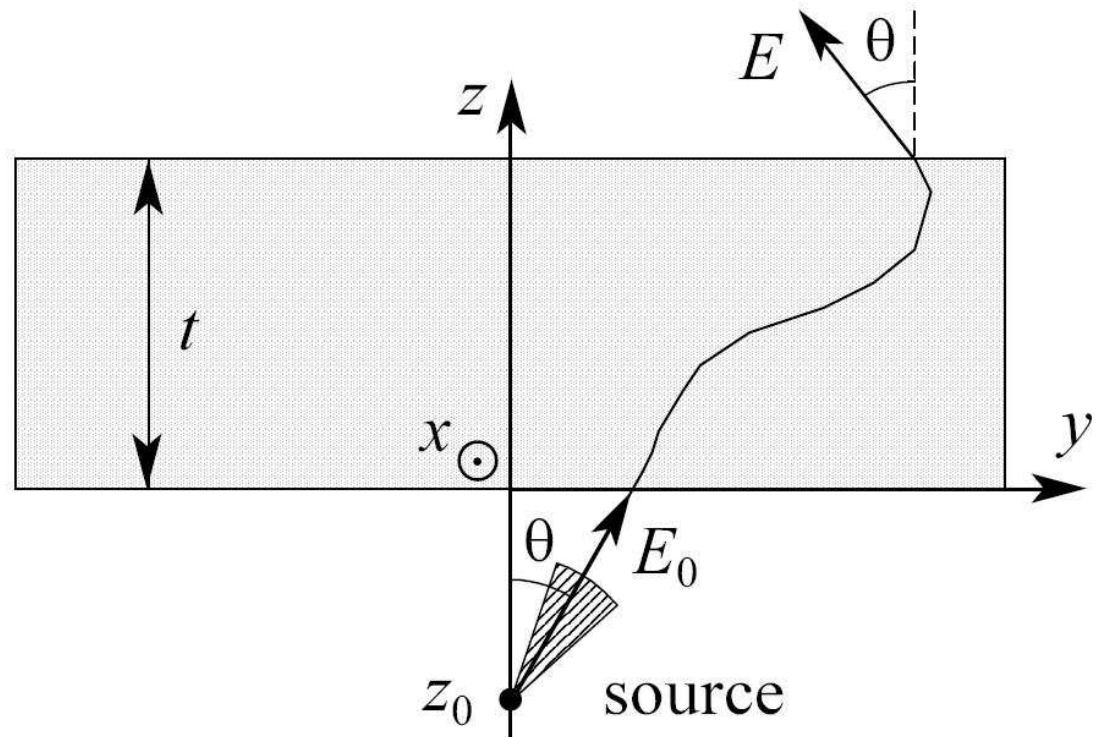
Hard inelastic collisions

PENSLAB

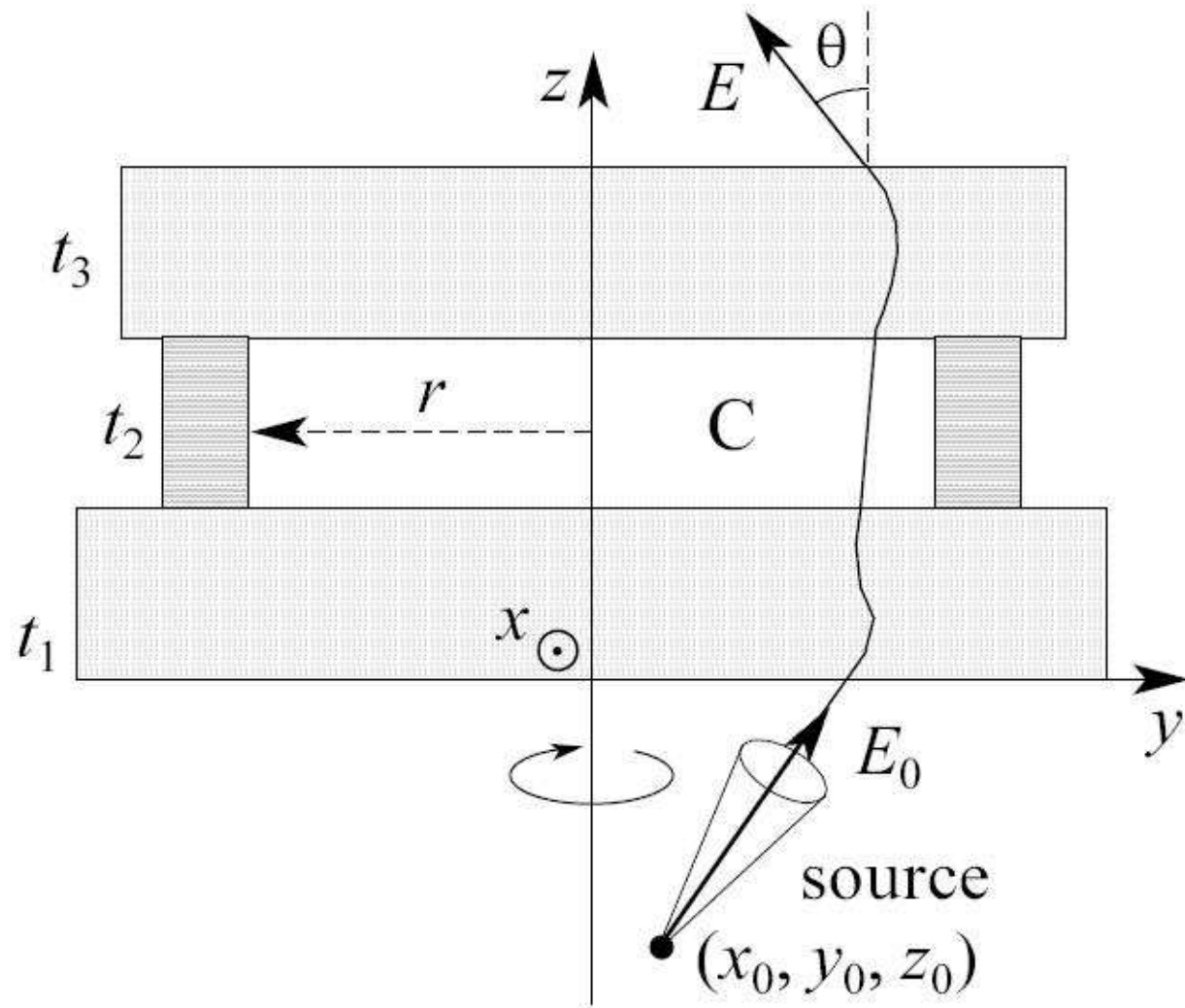
- cascadas de electrones/fotones en una muestra plana
(geometría simple)
- información sobre muchas cantidades de interés
- extensión lateral infinita, profundidad: 0...espesor
- energía de partículas incidentes E_0
fuente puntual a 'altura' Z_0
entre direcciones θ_1 y θ_2

PENSLAB

- extensión lateral infinita, profundidad: 0...espesor
- energía de partículas incidentes E_0
fuente puntual a 'altura' z_0
entre direcciones θ_1 y θ_2



PENCIL



PENCYL

- cascadas de electrones/fotones en estructuras **multicapas**
- cada capa: cilindros concéntricos homogéneos
perpendiculares al eje z , con centro según X, Y
(composiciones y radios)
- info sobre transporte y depósito de energía (simetría acimutal)
- espectro de energía para partículas incidentes
fuente puntual o extensa (cilíndrica) en $SX0, SY0, SZ0$
direcciones: cono de semiapertura $SALPHA$
con eje central en $STHETA, SPHI$

→ GVIEWC

PENDOSSES

- estructuras geométricas complejas (superficies cuádricas)
- fuente puntual monoenergética en X_0 , Y_0 , Z_0
direcciones: cono de semiapertura $SALPHA$ (eje en $STHETA$, $SPHI$)
- energía media depositada en cada cuerpo