



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

Eines computacionals avançades per a planificació radioterapèutica mitjançant simulacions Monte Carlo

Tesi Doctoral

Sandra Oliver Gil

Institut Universitari de Seguretat Industrial Radiofísica i
Mediambiental
Programa de Doctorat en Enginyeria i Producció Industrial
Universitat Politècnica de València

Dirigida per,

Dr. Rafael Miró Herrero
Dra. Belén Juste Vidal

Gener 2024

*I així pren, i així pren
tot el fruit que et pugui donar
el camí que, a poc a poc, escrius, per demà.
Que demà, que demà, mancarà el fruit de cada pas.
Per això, malgrat la boira, cal caminar.*

Lluís Llach.

Agraïments

Agrair, en primer lloc, als meus directors, Rafa i Belén, pel seu suport durant el desenvolupament de la tesi i per la confiança dipositada en mi durant aquests anys. I com no, a Gúmer, pel seu recolzament en tot el treball dut a terme. A tots tres, gràcies per les oportunitats.

Gràcies als companys i companyes de l'ISIRYM i del Departament d'Enginyeria Química i Nuclear, pels cafès, esmorzars i dinars, i els bons moments compartits en aquesta etapa. Als companys i companyes del Departament de Física Aplicada, gràcies per ser exemple i guia en els meus inicis en la docència. Espere que el futur ens permeta continuar treballant junts.

Vull agrair també a totes les persones amb les que he col·laborat en aquest temps, alguns, coautors dels treballs de la tesi. En especial a Javier i Facundo, per continuar contribuint a la meua formació, des de fa ja més d'una dècada, i també a Pepe, per comptar sempre amb nosaltres i estar disposat a ajudar en tot el que estiga en la seua mà. Espere que les col·laboracions perduren en el temps.

Agraïsc a la meua família estar sempre al meu costat i acompanyar-me en el camí que he triat. En especial, als de casa, mamà, papà, María, sé que puc comptar amb vosaltres en qualsevol moment i situació, i això dona una tranquil·litat immensa. María, gràcies pel temps compartit i per la teua alegria, t'estime.

A la família Ateneu, gràcies per ser sempre llar.

I a tu, Vicent, gràcies per donar-me ales, per alentir-me i creure en mi. Gràcies per tot el que has aportat a aquesta tesi, i a la meua vida. Gràcies per ser sempre el millor moment del dia. Tot eixirà bé.

Finalment, agrair a tots els qui estan, encara que ja no estan. Vicent, tan de bo haguéssim pogut discutir els resultats d'aquesta tesi, gràcies per cada segon compartit.

Índex

Agraïments	5
Abreviatures	11
Resum	13
Estructura de la tesi	19
I Introducció.	1
I.1 Contextualització.	1
I.1.1 Tractaments amb radioteràpia.	2
I.1.1.1 Radioteràpia externa.	2
I.1.1.2 Radioteràpia intraoperatòria.	3
I.1.2 Càlcul de dosi i planificació de tractaments.	4
I.1.3 Reproductibilitat.	5
I.1.4 Objectius.	7
I.2 Radiacions ionitzants en Física Mèdica	8
I.2.1 Dosimetria de les radiacions en física mèdica.	8
I.2.1.1 Conceptes fonamentals.	8
I.2.1.2 Mesura de la radiació: magnituds i unitats dosimètriques.	8
I.2.2 Feixos de radioteràpia externa.	11
I.2.2.1 Acceleradors lineals convencionals, LinAcs.	11
I.2.2.2 Acceleradors mòbils de radioteràpia intraoperatòria IOeRT.	13
I.2.2.3 Característiques dosimètriques dels feixos clínics.	14
I.2.2.4 Tipus de tractaments amb radiació externa, planificació i avaluació de dosi a teixits sans i objectiu.	18
I.2.3 Instruments de mesura de dosi.	20
I.2.3.1 Càmeres d'ionització.	21
I.2.3.2 Díodes.	21
I.2.3.3 Pel·lícules radiocròmiques.	22
I.2.3.4 Monitors ambientals.	22
I.2.3.5 Llistat d'instruments de mesura emprats.	23
I.3 Mètode de Monte Carlo en física mèdica	24
I.3.1 Definició del mètode de Monte Carlo i evolució històrica.	24
I.3.2 Conceptes bàsics.	25
I.3.2.1 Generació de nombres aleatoris.	25
I.3.2.2 Mostreig de distribucions.	25
I.3.2.3 Incerteses en la simulació Monte Carlo.	28
I.3.3 Geometries.	31

I.3.4	Optimització de les simulacions.	34
I.3.4.1	Energies de tall.	34
I.3.4.2	Tècniques de reducció de variància.	34
I.3.4.3	Espais de fase.	36
I.3.4.4	Paral·lelització de les simulacions.	37
I.3.5	Codis de Monte Carlo aplicats a simulacions en física mèdica.	38
I.3.5.1	MCNP: <i>Monte Carlo N-Particle</i>	39
I.3.5.2	PENELOPE: <i>Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons</i>	43
I.3.5.3	penRed: Parallel Engine for Radiation Energy Deposition.	45
I.4	Maniquins per a mesures de dosi	47
I.4.1	Maniquins experimentals.	47
I.4.2	Maniquins en simulació MC.	48
I.4.2.1	Maniquí computacional mallat de la Comissió Internacional en Protecció Radiològica, <i>International Commission on Radiological Protection</i> (ICRP) Publicació 145.	49
II	Recerca científica.	51
II.1	Eines de conversió entre formats d'espai de fase	51
II.1.1	Introducció i motivació.	51
II.1.2	Objectius de l'estudi.	52
II.1.3	Materials i mètodes.	52
II.1.3.1	Descripció de les eines: IAEA2MCNP i MCP2IAEA.	52
II.1.3.2	Descripció dels formats d'espai de fase de la IAEA i MCNP6.	53
II.1.3.3	Proves de verificació de les eines desenvolupades: IAEA2MCNP i MCNP2IAEA.	54
II.1.3.4	Tests complets d'un exemple complex.	55
II.1.4	Resultats.	57
II.1.5	Article.	59
II.2	Filtre aplanador per a IOeRT d'alta energia	74
II.2.1	Introducció i motivació.	74
II.2.2	Objectius de l'estudi.	74
II.2.3	Materials i mètodes.	74
II.2.3.1	Accelerador de IOeRT.	74
II.2.3.2	Simulacions de Monte Carlo.	75
II.2.3.3	Validació experimental del filtre dissenyat.	77
II.2.4	Resultats.	78
II.2.4.1	Simulacions de Monte Carlo.	78
II.2.4.2	Validació experimental del filtre, impacte sobre el feix clínic i sobre la radiació dispersa.	79
II.2.5	Article.	80
II.3	Generació de PSFs per a planificació amb LinAcs	90
II.3.1	Introducció i motivació.	90
II.3.2	Objectius de l'estudi.	90
II.3.3	Materials i mètodes.	91
II.3.3.1	Base de dades de funcions de probabilitats precalculades.	91
II.3.3.2	Generació i validació dels espais de fase computacionals. Exemples senzills.	94

II.3.3.3	Exemple complex: tractament d'irradiació de pròstata. . . .	95
II.3.4	Resultats.	96
II.3.4.1	Validació del PSF generat.	96
II.3.4.2	Irradiació de pròstata.	104
II.4	Incorporació de geometries CAD a penRed	107
II.4.1	Introducció i motivació.	107
II.4.2	Objectius de l'estudi.	108
II.4.3	Materials i mètodes.	108
II.4.3.1	Algorisme.	108
II.4.3.2	Construcció de geometries.	110
II.4.3.3	Validació i optimització.	110
II.4.4	Resultats.	111
II.4.4.1	Validació.	111
II.4.4.2	Optimització.	112
II.4.5	Article.	113
III	Conclusions i treball futur.	145
IV	Programari i publicacions.	149
IV.1	Programari desenvolupat.	149
IV.2	Publicacions en revistes científiques indexades.	149
IV.3	Contribucions a congressos.	150
IV.3.1	Congressos internacionals.	150
IV.3.2	Congressos nacionals.	151
IV.4	Premis d'investigació.	152

Abreviatures

- AAPM** Associació Americana de Física Mèdica, *American Association of Physicists in Medicine*. 39
- CAD** Disseny Assistit per Ordinador, *Computed-Aided Design*. 6, 107, 108, 110
- DCS** Seccions Eficaces Diferencials, *Differential Cross Section*. 24
- DICOM** Imatge Digital i de Comunicacions en Medicina, *Digital Imaging and Communications in Medicine*. 31, 32, 39, 47
- DVH** Histogrames de Dosi Volum, *Dose Volume Histogram*. 47
- ECIS** Sistema Europeu d'Informació del Càncer, *European Cancer Information System*. 2
- EPC** Equilibri de Partícules Carregades. 10
- IAEA** Agència Internacional d'Energia Atòmica, *International Atomic Energy Agency*. 6, 8, 13, 15, 19, 37, 45, 47, 52–55, 57, 58, 90, 94, 145, 146
- ICRP** Comissió Internacional en Protecció Radiològica, *International Commission on Radiological Protection*. 8, 49, 50, 95, 108, 110, 111, 146
- IOeRT** Radioteràpia Intraoperatoria d'Electrons, *Intraoperative Electron Radiotherapy*. 3, 4, 7, 13, 15, 16, 18–20, 48, 74, 147
- KERMA** Energia Cinètica Alliberada per unitat de Massa, *Kinetic Energy Released per unit MA*ss. 9, 41
- LANL** Los Alamos National Laboratory. 39, 107
- LinAc** Accelerador Lineal mèdic, *Linear Accelerator*. 2–5, 7, 11–13, 15–20, 36, 37, 51, 52, 55, 90–92, 94, 98, 145, 146
- MC** Monte Carlo. 5–8, 24, 25, 28, 29, 33–35, 37, 39, 47, 48, 51, 52, 54, 75–79, 90, 98, 107, 111, 145–147
- MCNP** Monte Carlo N-particle. 8, 13–16, 19, 39–42, 47, 50, 52–59, 75, 76, 78, 79, 90, 91, 94–96, 107, 110–112, 145, 146
- MLC** Col·limador Multilàmines, *Multi Leaf Collimator*. 3, 13, 90–98, 102, 146
- MPI** *Message Passing Interface*. 38, 39, 109

- MRCP** Maniquís Computacionals de Referència de tipus Malla, *Mesh-type Reference Computational Phantoms* . 49, 50, 95, 96, 104, 106, 110–112, 146, 147
- NEA** Agència d'Energia Nuclear, *Nuclear Energy Agency*. 52, 149
- OOB** *Oriented Bounding Box*. 107
- PDD** Percentatge de Dosi en Profunditat, *Percentage Depth Dose* . 15, 16, 21, 55, 57, 77–79, 99, 101, 145
- PDF** Funció Densitat de Probabilitat, *Probability Density Function*. 24, 25, 27–29
- PET** Tomografia per Emissió de Positrons, *Positron Emission Tomography*. 1, 39
- PSF** Fitxer d'Espai de Fases, *Phase Space File*. 6–9, 36, 37, 41, 42, 44, 45, 52–55, 57–59, 76, 90–105, 145–147
- RTPS** Sistemes de Planificació de Tractaments de Radioteràpia, *Radiotherapy Planning Systems*. 4, 5
- SPECT** *Single Photon Emission Computed Tomography*. 1, 39
- SSD** Distància Font Superfície, *Source Surface Distance*. 14, 15, 57
- TC** Tomografia Computeritzada. 1, 4, 5, 18, 31, 39, 47, 147
- TG** *Task Group*. 39
- UE27** Unió Europea. 2
- UM** Malla No Estructurada, *Unstructured Mesh*. 40

Resum

La tesi presentada a aquest document, s'emmarca dins de l'àmbit de la física mèdica. Dins d'aquesta branca de la física, es desenvolupen eines computacionals per oferir millores en la planificació de tractaments que involucren radiació ionitzant. En aquestes planificacions, es calculen factors dosimètrics com la dosi total absorbida tant, a la regió d'interès del tractaments, objectiu del mateix, com a la resta de teixits o òrgans de risc propers a la zona objectiu. Per poder efectuar aquests càlculs, existeixen diferents tècniques, sent les simulacions basades en Monte Carlo les considerades com l'eina més precisa. Aquest tipus de simulacions, permeten modelitzar els dispositius mèdics que emeten el feix de tractament als pacients, de forma detallada. A més, les simulacions Monte Carlo, permeten descriure les fonts de radiació minuciosament i considerar el transport de les partícules involucrades en el problema a través de la geometria considerada.

En els treballs que conformen aquesta tesi, s'han emprat diferents codis Monte Carlo, i són MCNP6, penEasy i penRed, depenent del problema a dur a terme. Per exemple, MCNP6 s'ha emprat a diferents treballs per la capacitat, i facilitat, de modelar geometries complexes emprant mallats volumètriques, penEasy com a codi per validar algunes de les eines dissenyades i penRed, per les característiques especialitzades en física mèdica, com la lectura i processament automàtic de DICOM i les fonts de braquiteràpia, el que faciliten molt les simulacions en l'entorn mèdic. De fet, penRed ja es va dissenyar amb aquest objectiu en la seua primera versió, treball en el qual l'autora ja participava en el seu desenvolupament. Degut a estos fets, i a que penRed, és de codi obert i no requereix llicència, com al cas del MCNP, s'ha decidit estendre les capacitats que manquen en este, per poder equiparar el seu ús a la resta de codis en els problemes abordats durant la realització de la tesi doctoral.

Tots aquests treballs contribueixen al desenvolupament d'eines que, mitjançant la simulació Monte Carlo, permeten optimitzar els càlculs en radioteràpia. Més encara, les eines desenvolupades, tenen una aplicabilitat més general i poden emprar-se en altres camps o problemes, com, per exemple, diagnòstic basat en imatge mèdica.

El primer dels treballs, cobreix la necessita del codi MCNP6 de ser capaç de llegir i escriure fitxers d'espai de fase en format estàndard de la Agència Internacional d'Energia Atòmica, *International Atomic Energy Agency* (IAEA). Molts dels codis de simulació Monte Carlo, tenen implementada aquesta eina. Aquest fet permet llegir informació de feixos a l'eixida de diferents dispositius mèdics, ja siga proporcionats per grups d'investigació o per fabricants, i realitzar simulacions dirigint el feix a diferents elements, maniquins o pacients. D'aquesta manera s'estalvia temps en la realització repetida de simulacions, la qual cosa pot contribuir a l'optimització de les planificacions si aquests feixos s'empren per a aquest propòsit. Per suplir la manca de MCNP6 d'aquesta capacitat, es desenvolupa en aquesta tesi un codi capaç de realitzar aquestes conversions entre format d'espai de fase intern de MCNP6 i formats IAEA i a l'inrevés.

Al segon treball, s'empren simulacions Monte Carlo per tal de dissenyar un filtre que homogeneïtze el feix d'electrons de 12 MeV a l'eixida d'un accelerador de radioteràpia intra-

operatòria. Donat que, per a una certa configuració de l'accelerador els especialistes clínics havien notat que el feix d'eixida no era del tot homogeni, es va proposar participar en el disseny del filtre esmenat. Gràcies a les eines desenvolupades anteriorment, el disseny i validació del filtre es va poder dur a terme partint de l'espai de fase a l'eixida de l'accelerador proporcionat per la companyia. El treball proporciona una configuració de filtre, dissenyada amb simulació Monte Carlo i validada amb altre grup d'investigació independent. A partir de les dades proporcionades amb les simulacions, el filtre es va construir i validar el seu propòsit experimentalment. La metodologia proporcionada al treball per realitzar aquests tipus de càlculs, es pot estendre a altres configuracions d'acceleradors, feix energètic i aplicador del mateix.

El tercer treball, es basa en oferir una millora als elevats temps de computació a l'hora de realitzar planificacions de radioteràpia amb simulacions Monte Carlo per a tractaments amb diferents irradiacions angulars. La proposta del treball, es centra en presentar una metodologia per a la generació computacional d'espais de fase que caracteritzen el feix provinent del dispositiu segons les seues possibles configuracions tenint en compte la mida i forma de la lesió a irradiar. Açò es tradueix en conformar el feix segons les diferents posicions del col·limador multilàmines, que forma part dels acceleradors lineals mèdics. Amb aquesta eina es pretén agilitzar significativament el procés de càlcul de distribució de dosi en el maniquí o pacient, sense haver de realitzar la simulació a través de tots els components de l'accelerador. L'eina desenvolupada, combinada amb les del primer treball, permeten que els resultats presentat puguen ser utilitzats independentment del codi Monte Carlo.

Finalment, arrel d'haver emprat geometries basades en malles en les simulacions realitzades amb MCNP6 en els anteriors treballs, s'ha vist la importància d'aquesta capacitat, especialment en simulacions en l'àmbit de la física mèdica. La definició de geometries per descriure el sistema, és una part fonamental de qualsevol simulació, independentment del codi que s'utilitza per a dur-la a terme. És per això que, el quart treball, es centra en el desenvolupament d'un mòdul per a simular sobre geometries mallades en penRed, el qual no tenia encara implementada aquesta funcionalitat. Més encara, no sols penRed, sinó la resta de codis basats en PENELOPE, no disposen d'aquesta funcionalitat, pel que, del resultat d'aquest treball, es pot beneficiar no sols els usuaris de penRed sinó els usuaris de la llibreria PENELOPE en general.

Resumen

La tesis presentada en este documento se enmarca dentro del ámbito de la física médica. Dentro de esta rama de la física, se desarrollan herramientas computacionales para ofrecer mejoras en planificación de tratamientos que involucren radiación ionizante. En estas planificaciones, se calculan factores dosimétricos como la dosis total absorbida tanto en la región de interés de tratamiento, objetivo del mismo, como al resto de tejidos u órganos de riesgo próximos a la zona objetivo. Para poder efectuar estos cálculos, existen diferentes técnicas, siendo las simulaciones basadas en Monte Carlo las consideradas como la herramienta más precisa. Este tipo de simulaciones permiten modelizar los dispositivos médicos que emiten el haz de radiación de tratamiento a los pacientes, de manera detallada. Además, las simulaciones Monte Carlo permiten describir las fuentes de radiación minuciosamente y considerar el transporte de las partículas involucradas en el problema a través de la geometría considerada.

En los trabajos que conforman esta tesis, se han utilizado diferentes códigos Monte Carlo, que son MCNP6, penEasy y penRed, dependiendo del problema a abordar. Por ejemplo, MCNP6 se ha empleado en varios trabajos debido a su capacidad y facilidad para modelar geometrías complejas utilizando mallas volumétricas, penEasy como código para validar algunas de las herramientas diseñadas, y penRed, por sus características especializadas en física médica, como la lectura y procesamiento automático de DICOM y las fuentes de braquiterapia, lo que facilita mucho las simulaciones en el entorno médico. De hecho, penRed ya fue diseñado con este objetivo en su primera versión, en la cual la autora ya participaba en su desarrollo. Debido a estos hechos, y dado que penRed es de código abierto y no requiere licencia, a diferencia de MCNP, se ha decidido ampliar las capacidades que le faltan para poder equiparar su uso al de los demás códigos en los problemas abordados durante la realización de la tesis doctoral.

Todos estos trabajos contribuyen al desarrollo de herramientas que, mediante la simulación Monte Carlo, permiten optimizar los cálculos en radioterapia. Más aún, las herramientas desarrolladas, tienen una aplicabilidad más general y pueden usarse en otros campos o problemas, como, por ejemplo, diagnóstico basado en imagen médica. El primero de ellos cubre la necesidad del código MCNP6 de ser capaz de leer y escribir archivos de espacio de fase en formato de la Agencia Internacional de Energía Atómica, International Atomic Energy Agency (IAEA). Muchos de los códigos de simulación Monte Carlo, tienen implementada esta herramienta. Esto permite leer información de haces en la salida de diferentes dispositivos médicos, ya sea proporcionada por grupos de investigación o fabricantes, y realizar simulaciones dirigiendo el haz a diferentes elementos, maniquíes o pacientes. De esta manera, se ahorra tiempo en la realización repetida de simulaciones, lo que puede contribuir a la optimización de las planificaciones si estos haces se utilizan para este propósito. Para suplir la falta de esta capacidad en MCNP6, en esta tesis se desarrolla un código capaz de realizar estas conversiones entre el formato de espacio de fase interno de MCNP6 y formatos IAEA y viceversa.

En el segundo trabajo, se utilizan simulaciones Monte Carlo para diseñar un filtro que

homogenice el haz de electrones de 12 MeV en la salida de un acelerador de radioterapia intraoperatoria. Dado que, para una cierta configuración del acelerador, los especialistas clínicos habían notado que el haz de salida no era completamente homogéneo, se propuso participar en el diseño del filtro mencionado. Gracias a las herramientas desarrolladas anteriormente, el diseño y validación del filtro se pudo llevar a cabo a partir del espacio de fase en la salida del acelerador proporcionado por la compañía. El trabajo proporciona una configuración de filtro, diseñada con simulación Monte Carlo y validada con otro grupo de investigación independiente. A partir de los datos proporcionados con las simulaciones, se construyó el filtro y se validó su propósito experimentalmente. La metodología proporcionada en el trabajo para realizar este tipo de cálculos se puede extender a otras configuraciones de aceleradores, haz energético y aplicador del mismo.

El tercer trabajo, se basa en ofrecer una mejora a los elevados tiempos de computación al realizar planificaciones de radioterapia con simulaciones Monte Carlo para tratamientos con diferentes irradiaciones angulares. La propuesta del trabajo se centra en presentar una metodología para la generación computacional de espacios de fase que caractericen el haz proveniente del dispositivo según sus posibles configuraciones teniendo en cuenta el tamaño y forma de la lesión a irradiar. Esto se traduce en conformar el haz según las diferentes posiciones del colimador multiláminas, que forma parte de los aceleradores lineales médicos. Con esta herramienta se pretende agilizar significativamente el proceso de cálculo de distribución de dosis en el maniquí o paciente, sin tener que realizar la simulación a través de todos los componentes del acelerador. La herramienta desarrollada, combinada con las del primer trabajo, permiten que los resultados presentados puedan ser utilizados independientemente del código Monte Carlo.

Finalmente, dado que se utilizaron geometrías basadas en mallas en las simulaciones realizadas con MCNP6 en los trabajos anteriores, se ha visto la importancia de esta capacidad, especialmente en simulaciones en el ámbito de la física médica. La definición de geometrías para describir el sistema, es una parte fundamental de cualquier simulación, independientemente del código que se utilice para llevarla a cabo. Es por eso que el cuarto trabajo se centra en el desarrollo de un módulo para simular sobre geometrías malladas en penRed, el cual no tenía implementada aún esta funcionalidad. Más aún, no solo penRed, sino el resto de códigos basados en PENELOPE, no disponen de esta funcionalidad, por lo que, del resultado de este trabajo, se pueden beneficiar no solo los usuarios de penRed sino los usuarios de la librería PENELOPE en general.

Abstract

The thesis presented in this document falls within the field of medical physics. Within this branch of physics, computational tools are developed to enhance treatment planning involving ionizing radiation.

In these planning processes, dosimetric factors such as the total absorbed dose are calculated not only in the treatment region of interest but also in surrounding tissues or organs at risk near the target area. To perform these calculations, different techniques exist, with Monte Carlo simulations considered the most precise tool. Such simulations allow for detailed modeling of medical devices emitting treatment radiation beams to patients. Additionally, Monte Carlo simulations enable a thorough description of radiation sources and consider the transport of particles involved in the problem throughout the considered geometry.

In the studies comprising this thesis, various Monte Carlo codes have been utilized, including MCNP6, penEasy, and penRed, depending on the problem being addressed. For instance, MCNP6 has been employed in several studies due to its capacity and ease in modeling complex geometries using volumetric meshes. PenEasy serves as a validation tool for some of the designed tools, while penRed, with its specialized features in medical physics such as the automatic reading and processing of DICOM and brachytherapy sources, greatly facilitates simulations in the medical environment. In fact, penRed was initially designed with this goal in mind, with the author already involved in its development. Due to these facts, and since penRed is open-source and does not require a license unlike MCNP, it has been decided to enhance its capabilities to match the usage of other codes in the problems addressed during the completion of the doctoral thesis.

All these efforts contribute to the development of tools that, through Monte Carlo simulation, optimize calculations in radiotherapy. Furthermore, the developed tools have broader applicability and can be used in other fields or problems, such as diagnosis based on medical imaging.

The first study addresses the need for the MCNP6 code to be able to read and write phase space files in the format of the International Atomic Energy Agency (IAEA). Many Monte Carlo simulation codes have this feature implemented. This allows reading beam information from the output of different medical devices, provided by research groups or manufacturers, and performing simulations directing the beam to different elements, phantoms, or patients. To address the lack of this capability in MCNP6, this thesis develops a code capable of performing these conversions between the internal phase space format of MCNP6 and IAEA formats and vice versa.

The second study uses Monte Carlo simulations to design a filter that homogenizes the 12 MeV electron beam at the output of an intraoperative radiotherapy accelerator. Since clinical specialists had noticed that the output beam was not completely homogeneous for a certain accelerator configuration, participation in the design of the mentioned filter was proposed. Thanks to the tools developed earlier, the design and validation of the filter could be carried out based on the phase space at the accelerator output provided by the

company. The study provides a filter configuration, designed with Monte Carlo simulation and validated with another independent research group. Based on the data provided by the simulations, the filter was constructed and its purpose experimentally validated. The methodology provided in the study for conducting this type of calculation can be extended to other accelerator configurations, beam energies, and applicator types.

The third study focuses on improving the high computation times when performing radiotherapy planning with Monte Carlo simulations for treatments with different angular irradiations. The proposal of the study focuses on presenting a methodology for the computational generation of phase spaces that characterize the beam from the device according to its possible configurations, taking into account the size and shape of the lesion to be irradiated. This translates into shaping the beam according to the different positions of the multileaf collimator, which is part of medical linear accelerators. This tool aims to significantly streamline the process of calculating dose distribution in the phantom or patient, without having to perform simulations through all components of the accelerator. The developed tool, combined with those from the first study, allows the presented results to be used independently of the Monte Carlo code.

Finally, since mesh-based geometries were used in the simulations performed with MCNP6 in the previous studies, the importance of this capability, especially in simulations in the field of medical physics, has been recognized. Defining geometries to describe the system is a fundamental part of any simulation, regardless of the code used to carry it out. That is why the fourth study focuses on developing a module to simulate on meshed geometries in penRed, which had not yet implemented this functionality. Furthermore, not only penRed but also the rest of the codes based on PENELOPE do not have this functionality, so the results of this work can benefit not only penRed users but also users of the PENELOPE library in general.

Estructura de la tesi

La tesi presentada es basa en un compendi d'articles, els quals es llisten a continuació:

- S. Oliver, B. Juste, R. Miró & G. Verdú: Toolkit implementation to exchange phase-space files between IAEA and MCNP6 Monte Carlo code format. *International Journal of Radiation Biology*, 99(3), 373-383 (2023). Taylor & Francis.
<https://doi.org/10.1080/09553002.2022.2110296>
- S. Oliver, J. Vijande, N. Tejedor-Aguilar, R. Miró, Juan J. Rovira-Escutia, F. Ballester, B. Juste, V. Carmona, G. Felici, G. Verdú, E. Sanchis, A. Conde, J. Pérez-Calatayud: Monte Carlo flattening filter design to high energy intraoperative electron beam homogenization, *Radiation Physics and Chemistry*, 212, 111102 (2023). Elsevier.
<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2023.111102>
- S. Oliver, B. Juste, R. Miró & G. Verdú: A methodology for computationally generating phase space files for Monte Carlo simulations applied to treatment plans for Medical Linear Accelerators. **(en revisió)**
- S. Oliver, S. Rodríguez-Boscà, V. Giménez-Alventosa: Enabling Particle Transport on CAD-Based Geometries for Radiation Simulations with penRed, *Computer Physics Communications*. (2024). Elsevier.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109091>

El document s'estructura de la següent manera: en primer lloc, s'introdueixen els fonaments teòrics que han estat necessaris per desenvolupar els treballs llistats. Aquesta presentació, es du a terme en el Capítol I, amb una contextualització per emmarcar el treball desenvolupat. A continuació, s'explica l'ús de les radiacions ionitzants en l'àmbit de la física mèdica, així com conceptes fonamentals del mètode de Monte Carlo i la seua aplicació en el mateix camp.

Seguidament, al Capítol II, es presenta la recerca científica duta a terme, basada en els treballs esmenats. Per a cada treball, s'inclou una breu descripció de la introducció i motivació del mateix, un resum dels materials i mètodes, així com dels resultats obtinguts per complir amb els objectius establerts.

Al Capítol III, es presenta una recopilació dels resultats obtinguts, així com unes conclusions globals de la tesi, acabant amb un conjunt de propostes per a futures línies d'investigació. Finalment, al capítol IV, es recull la contribució científica resultat de la tesi.

Capítol I

Introducció.

I.1 Contextualització.

Els treballs que conformen el present document, es centren en el desenvolupament d'eines computacionals avançades en l'àmbit de la física mèdica. En concret, es focalitzen en facilitar i optimitzar els càlculs involucrats en la recerca referent a tractaments de radioteràpia. Aquesta tècnica, emprada la radiació ionitzant per curar o alleujar els problemes derivats de dolences, majoritàriament, lesions oncològiques. Des dels seus inicis en l'àmbit mèdic, l'ús de tècniques basades en radiació ionitzant s'han popularitzat tant en diagnòstic, com en tractaments. Tant és així que, en qüestió de diagnòstic, el nombre de proves amb Tomografia Computeritzada (TC)[1] s'ha incrementat un 56% a Espanya entre 2010 i 2021, arribant als 133.8 exàmens per cada 1000 habitants [2]. Aquesta tendència no és un fet aïllat, trobant-la també a la resta de països, com França que ha incrementat el nombre de proves en un 81% entre 2007 i 2021 situant-se als 217.8 exàmens cada 1000 habitants o Alemanya havent-se incrementat un 77% entre 2005 i 2021 situant-se als 160 [2]. Aquest tipus de proves diagnòstiques, proporcionen una imatge detallada de les estructures internes del cos del pacient. Per aconseguir-ho, es fa passar radiació a través d'aquest i es mesura la radiació que no ha sigut absorbida. Els avantatges inherents a la tècnica, i pels quals s'ha popularitzat el seu ús [3, 4], són la seua disponibilitat i el poder diferenciar estructures internes de forma no invasiva, el que permet un diagnòstic precoç. No obstant, la contrapartida de l'ús d'aquesta modalitat d'imatge és la radiació absorbida pel pacient a causa dels raigs-x als que s'exposa. De fet, als Estats Units s'estima que la contribució del TC a l'exposició total dels pacients a la radiació, en l'àmbit mèdic, s'ha incrementat del 3% al 49% entre el 1980 i 2006 [5], on el nombre d'exàmens amb aquesta tècnica s'ha incrementat, aproximadament, un 10% anual durant els passats 13 anys. Aquesta dosi absorbida suposa un risc potencial per als pacients que s'han de sotmetre a aquesta prova mèdica. Això afecta especialment aquells que requereixen exploracions periòdiques per avaluar l'evolució de la malaltia, com pacients oncològics, o aquells que són més vulnerables a les radiacions ionitzants, com pacients embarassades o pediàtrics [6]. De fet, la radiació absorbida, a causa d'un elevat ús d'aquesta tècnica, pot arribar a induir càncers secundaris, sent un risc potencial per a la salut pública [7]. En conseqüència, qualsevol millora en aquesta tècnica, que involucre una disminució de la dosi rebuda pel pacient sense comprometre la qualitat de la imatge, té un impacte directe en la salut i benestar de la societat actual i futura. Per tant, inclús sense considerar altres tècniques diagnòstiques que involucren radiació, com la Tomografia per Emissió de Positrons, *Positron Emission Tomography* (PET) o la *Single Photon Emission Computed Tomography* (SPECT), la determinació precisa de la dosi absorbida pels pacients en tècni-

ques de diagnòstic, és crucial per a l'avaluació del risc als mateixos que estiguen associats amb la radiació, i per mantindre el principi ALARA (*As Low As Reasonably Achievable*). Respecte als tractaments, les tècniques basades en radiació ionitzant, destaquen en el tractament de dolences oncològiques. Donat que, actualment, aquestes dolences són una de les principals causes de mortalitat a nivell mundial [8], qualsevol millora en aquest àmbit tindrà un impacte social significatiu. Tant a Espanya com a la resta de la Unió Europea (UE27), aquesta dolença és la segona causa de mort, després d'aquelles ocasionades per problemes cardiovasculars [9]. Més encara, segons els resultats presentats pel Sistema Europeu d'Informació del Càncer, *European Cancer Information System (ECIS)* [10], s'estima un increment de la incidència de càncer en les pròximes dècades d'un 20.96% a la UE27 i d'un 36.80% a Espanya. Aquest fet, junt amb l'augment del coneixement adquirit entorn a la biologia i la física del càncer, ha ocasionat un increment notable dels recursos destinats a la prevenció, detecció i tractament en els darrers anys fins l'actualitat, i es preveu que continue augmentant en el futur [10]. A més dels recursos econòmics i sanitaris, ja siga amb equipament o personal, la comunitat científica ha aportat noves tècniques i eines que permeten deteccions i tractaments més precises, per tal d'augmentar el control tumoral i millorar la qualitat de vida dels pacients a llarg termini.

Algunes tècniques de tractament, es recolzen en l'ús de radiació ionitzant, el que es coneix com radioteràpia. Estes, es poden emprar de forma aïllada o combinada amb la quimioteràpia o immunoteràpia, entre altres. De fet, s'estima que en la UE27, més d'un 50% dels càncers diagnosticats, són tractats amb radioteràpia, almenys, una vegada al llarg de la història clínica de la malaltia [11]. Existeixen actualment diferents modalitats de tractaments amb radiació, entre les que destaquen la radioteràpia externa de fotons i electrons (convencional), protonteràpia, intraoperatòria, braquiteràpia o teràpia metabòlica. L'elecció d'un o altre tipus de tractament o inclús la combinació de diferents d'ells, es du a terme per un comitè d'especialistes oncològics i depèn, entre altres, del tipus i estadi del tumor i de la seua mida i/o localització.

I.1.1 Tractaments amb radioteràpia.

D'entre les modalitats esmenades, la present tesi es centra en radioteràpia externa convencional i intraoperatòria, i són aquestes les que es descriuran breument a continuació.

I.1.1.1 Radioteràpia externa.

La radioteràpia externa consisteix en la irradiació de lesions amb un feix extern incloent feixos d'electrons i fotons, així com de protons o partícules pesades. D'entre tots ells, els equips més econòmics i estesos en l'ús clínic, són els destinats a la producció de feixos de fotos i electrons, és a dir de radioteràpia convencional [12]. No obstant, s'ha demostrat que la protonteràpia, és una opció de tractament eficaç i segura per a pacients en els que la lesió es troba prop d'òrgans de risc, ja que pot reduir efectes secundaris. Tot i això, actualment, el seu ús és minoritari i queda reduït únicament a aquest tipus de casos, com per exemple els tractaments pediàtrics [13, 14], encara que està previst un augment d'instal·lació de dispositius de protonteràpia a Espanya en els propers anys.

Els dispositius capaços de generar feixos per a radioteràpia convencional, són els anomenats Accelerador Lineal mèdic, *Linear Accelerator (LinAc)* [12]. Aquests, treballen en el rang del megavoltatge, tant per a feixos de fotons com d'electrons. Degut a la radiació emesa per aquests dispositius, els tractaments que els involucren es realitzen en sales adequadament

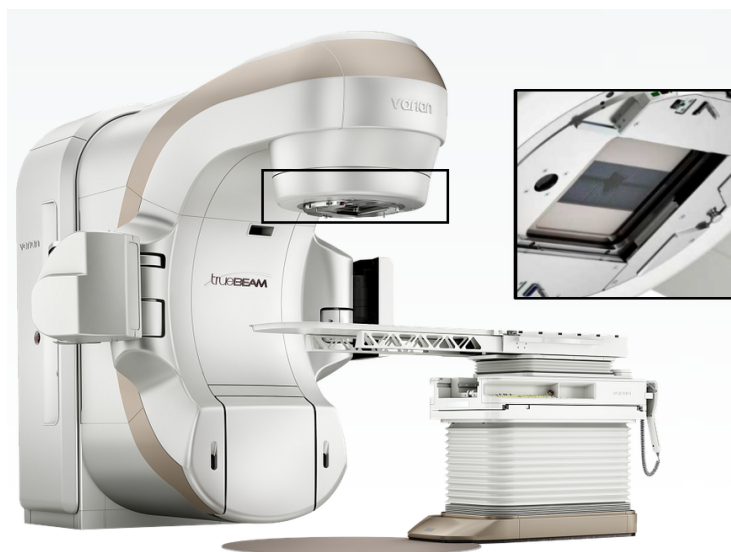


Figura I.1: LinAc TrueBeam Varian, dispositiu complet i imatge del col·limador multilàmines que conforma el feix d'eixida. Imatge extreta de <https://www.varian.com/>

blindades, per tal que la component dispersada del feix de radiació, no afecte al personal sanitari ni als pacients en les zones properes a la sala de tractament. Les característiques de cada tractament, com l'energia i tipus de partícula primària del feix, nombre de sessions d'irradiació, etc., depenen del quadre clínic de la lesió, i es decideix per professionals sanitaris atenent a les necessitats del pacient. Alguns tipus de LinAcs són capaços de donar una forma específica a la secció del feix resultant, mitjançant col·limadors. El component encarregat de conformar el feix, és el Col·limador Multilàmines, *Multi Leaf Collimator* (MLC). Aquest component està format per nombroses làmines metàl·liques paral·leles, que es poden moure de forma independent modificant així la dimensió i forma de l'apertura d'eixida del feix. Un exemple d'accelerador i MLC, es mostra a la Figura I.1, que correspon a un LinAc Varian. Així doncs, amb el MLC, es pot adequar la forma del feix depenent de la lesió a tractar i evitar irradiar les zones properes de teixit sa. A més, aquests tractaments s'imparteixen irradiant des de diferents posicions angulars (orientacions), gràcies a la mobilitat que ofereix el braç dels LinAcs, podent conformar-se el feix a elecció en cadascuna d'aquestes posicions, oferint així un tractament més eficient.

I.1.1.2 Radioteràpia intraoperatòria.

En les darreres dècades, s'ha establert una nova modalitat de tractament en diferents hospitals arreu del món [15]. És el cas de la radioteràpia intraoperatòria. Aquesta, es caracteritza per ser impartida durant l'operació quirúrgica, fet que permet, en general, una visualització directa de la regió a tractar i la possibilitat de protegir teixits circumdants. Donades les seues característiques, permet aplicar dosis més elevades directament a la regió objectiu millorant l'eficiència del tractament. Típicament s'imparteix una vegada s'ha extret el tumor i s'irradia la zona adjacent per tal d'acabar amb les cèl·lules canceroses residuals del llit tumoral [16, 17]. Els tractaments d'intraoperatòria, s'imparteixen per dispositius dedicats especialitzats, que permeten irradiar de forma segura en les condicions descrites. En aquest cas, s'empren acceleradors lineals, entre ells els acceleradors de Radioteràpia Intraoperatoria d'Electrons, *Intraoperative Electron Radiotherapy* (IOeRT), coneguts com acceleradors mòbils. Un exemple d'aquest tipus d'acceleradors, el podem veure a la Figura I.2. A diferència



Figura I.2: Accelerador LIAC SIT Sordina. Imatge extreta de <https://www.soiort.com/>

dels LinAcs, els dispositius d'IOeRT, s'empren en quiròfans convencionals (sense blindar) en presència del personal mèdic i durant la cirurgia d'extirpació. Açò és possible gràcies al seu disseny, ja que és raonablement lleuger com per poder desplaçar-lo sense haver de moure al pacient i evitant els problemes referents a esterilització que això comporta [18]. A més, han sigut dissenyats específicament per minimitzar la radiació dispersa, per tal de salvaguardar la salut del personal i el pacient [19]. El rang d'energies en el que operen els IOeRT, està comprès entre els 6 i 12 MeV. Es solen emprar en combinació amb aplicadors de diferents mides i bisellats, segons la profunditat i ubicació de la zona a tractar [20].

I.1.2 Càlcul de dosi i planificació de tractaments.

Per poder predir el comportament de la radiació, en el cas de tractaments de radioteràpia, s'han implementat en l'àmbit clínic, els Sistemes de Planificació de Tractaments de Radioteràpia, *Radiotherapy Planning Systems* (RTPS). Aquests sistemes, permeten simular la irradiació del pacient, per al qual es requereix, idealment, informació personalitzada d'aquest, com la seua anatomia. Aquesta informació, s'obté a partir d'imatges provinents de dispositius de diagnòstic, com el TC. Durant la planificació, s'estableixen tant els valors de dosi que s'han d'impartir a l'objectiu, com els valors llindars que no han de superar-se en teixits i òrgans sans circumdants [21]. L'objectiu principal dels RTPS, és simular la distribució de dosi en el pacient, assegurant que s'acompleixen els valors establerts. Els RTPS, han de ser suficientment precisos com per donar valors de distribució de dosi dins de les incerteses establertes en els protocols [22]. Per poder oferir aquestes prestacions, alguns dels RTPS actuals, es basen en models deterministes, o implementen algunes aproximacions en el càlcul de les distribucions de dosi. Per exemple, alguns models simplifiquen les heterogeneïtats del teixit, la qual cosa pot resultar en certes imprecisions en l'administració real de dosi en comparació amb la planificada [23]. Mentre que altres, no proporcionen resultats precisos fora de l'àrea de tractament, és a dir, no consideren la generació de radiació secundària que pot ser causant de càncers secundaris [24].

D'altra part, és ben sabut que, per poder predir el comportament de la radiació a través

de la matèria i així estudiar els seus efectes sobre els pacients, les simulacions Monte Carlo (MC) estan considerades com l'estàndard a seguir [25, 26]. Aquesta tècnica és àmpliament utilitzada des de fa unes dècades en diferents àmbits on s'involucre radiació ionitzant, incloent la física mèdica. Les simulacions MC permeten simular el transport de partícules, carregades i no carregades, a partir del coneixement de les distribucions de probabilitat que governen les seues interaccions individuals en diferents medis materials. A partir d'estes simulacions es pot extraure informació com, dosi dipositada en òrgan o fluència de partícules entre altres, com es discutirà amb detall en la Secció I.3.

En l'àmbit de la física mèdica, aquestes simulacions s'empren comunament per a diferents propòsits, per al disseny de dispositius clínics [27, 28, 29], disseny d'elements de filtratge de feixos [30, 31, 32], dosimetria i planificació de tractaments de radioteràpia [33, 34, 34, 35, 36, 37, 38], entre altres.

En el cas del seu ús en planificació radioterapèutica, ja en la dècada dels anys 90, estudis de diferents investigadors [39, 40, 41, 42] suggerien que els sistemes de planificació basats en MC, es convertirien en les eines predominants per als càlculs. La precisió del mètode MC per sobre dels models deterministes és ben coneguda, especialment quan els feixos incideixen en interfícies entre medis materials amb canvis bruscos de densitat, o en presència d'heterogeneïtats. Malgrat la seua precisió, l'inconvenient principal del mètode MC radica en l'elevat cost computacional que requereix la planificació amb aquesta eina. A més, els càlculs MC requereixen una descripció detallada de la geometria del sistema que es preten simular. Per exemple, al cas que ens ocupa, aquest quedaria definit per la geometria del LinAc i l'estructura del pacient, que es podria obtenir a partir d'un TC. Aquestes geometries poden arribar a ser molt complexes, facilitat que s'introduïsqen errors durant la seua construcció, que afecten al resultat final. És per això que, tot i que actualment alguns fabricants comercials com Elekta (<https://www.elekta.com/>), BrainLab (<https://www.brainlab.com/>) o Varian (<https://www.varian.com/>), ofereixen planificadors que empren simulació MC aquest mètode no s'utilitza encara de forma extensiva en tots els RTPS. En els planificadors esmenats, s'ha de tenir en compte que l'ús de simulació MC es fa, bé de forma parcial i combinada amb altres mètodes de càlcul de dosi, o bé incorporant simplificacions en els càlculs per poder oferir resultats en temps raonables clínicament.

Des de l'aplicació del MC en sistemes de planificació, s'han abordat nombroses vies d'optimització dels codis, així com aproximacions que permeten millorar els temps de càlcul sense comprometre els resultats de les distribucions de dosi.

I.1.3 Reproductibilitat.

En investigació, és fonamental que els resultats obtinguts puguen corroborar-se per diferents grups de recerca, així com poder ser emprats per la comunitat científica de manera independent. No obstant, enquestes realitzades a la comunitat científica, revela que més del 70% dels enquestats, manifesten no ser capaços de reproduir resultats de publicacions científiques [43]. Les dades mostren aleshores, valors preocupants pel que fa a la reproductibilitat.

En el camp de la física mèdica, existeixen diferents punts claus que poden afectar a aquesta reproductibilitat, entesa com la capacitat de reproduir els resultats a partir d'un conjunt de dades i metodologia donat. En el cas que ens ocupa de simulacions MC, un problema comú són els diferents formats amb els quals treballen els diferents codis existents. Cada codi, sol tindre un format propi, per exemple, per llegir la geometria sobre la que es va a realitzar el transport de les partícules. També és comú trobar que cada codi MC té un format propi per escriure i llegir els fitxers on s'emmagatzema informació de la font de

radiació, coneguts com Fitxer d'Espai de Fases, *Phase Space File* (PSF), que es descriuran en la Secció I.3.4.3. Com s'ha dit abans, el procés de construir la geometria, pot ser complex i tediós, però, a més, cada codi MC empra, en general formes diferents per a definir aquestes. Aquest fet, dificulta encara més la reproductibilitat entre simulacions, ja que no és senzill construir geometries equivalents per poder ser simulades amb codis diferents. Una solució a aquest problema, és utilitzar formats estàndard de geometria que faciliten la compatibilitat. En aquesta línia, molts codis han implementat suport per a formats Disseny Assistit per Ordinador, *Computed-Aided Design* (CAD), com es discutirà a la Secció I.3.3. El mateix problema es troba als PSF. Com es veurà a la Secció I.3.4.3, cada codi defineix format propis per emmagatzemar la informació. Afortunadament, en aquest cas, sí que existeix un format estàndard ben establert, i és el definit en la Agència Internacional d'Energia Atòmica, *International Atomic Energy Agency* (IAEA), que compta inclús, amb una base de dades per caracteritzar diferents dispositius mèdics.

En ambdós casos, els formats estandarditzats contribueixen a facilitar la reproducció dels resultats, estalviant temps i recursos. Els diferents grups de recerca, poden compartir tant les geometries com els PSFs generats, ja verificats, per a ser utilitzats per la comunitat científica. A més de millorar la reproductibilitat, també redueix les possibles fonts d'errors.

I.1.4 Objectius.

L'objectiu troncal d'aquesta tesi, és el desenvolupament i ús d'eines computacionals, centrades en tècniques Monte Carlo, aplicades al camp de la física mèdica. En concret, aquestes eines s'han desenvolupat per a la millora en el diagnòstic i tractament de lesions oncològiques emprant radiació ionitzant.

Per a aconseguir-ho, en primer lloc, es desenvoluparan eines per tal d'oferir compatibilitat entre espais de fase calculats amb diferents codis de MC. Aquestes eines, permetran utilitzar tant feixos proporcionats pels fabricants d'acceleradors o altres dispositius mèdics, com per altres grups d'investigació, per realitzar càlculs dosimètrics. A més, l'eina en qüestió, té com a propòsit millorar la interoperabilitat i eficiència de les simulacions de processos radiològics, contribuint així a l'avançament de les tecnologies aplicades en el camp.

En segon lloc, i fent ús de les eines desenvolupades prèviament, s'abordarà el disseny d'un filtre aplanador per a un accelerador d'intraoperatòria. El disseny, es realitzarà a partir de la informació proporcionada pel fabricant. L'objectiu d'aquesta part és aconseguir l'homogeneïtat de feixos d'electrons d'elevada energia, el que és essencial per a garantir la uniformitat en la distribució de radiació, la qual cosa té implicació directa en els tractaments mèdics.

En tercer lloc, altra de les eines desenvolupades té com a objectiu generar, computacionalment, PSF destinats a simulació MC, específicament aplicades a planificació de tractaments amb LinAcs. El present objectiu, oferirà una nova eina per a la planificació amb LinAc, optimitzant els temps de simulació per a que es puguin realitzar en temps raonables en la clínica mèdica. A més, fent ús de les eines desenvolupades en el primer dels objectius de la tesi, els fitxers generats, seran compatibles amb diferents codis de simulació.

Finalment, degut als avantatges de la simulació sobre geometries CAD, es desenvoluparà un mòdul per implementar la capacitat de simular sobre aquests tipus de geometries en penRed, codi que es presenta en la Secció I.3.5.3. S'aconseguirà així, tant facilitar el procés de construcció de geometria, com la capacitat de reproductibilitat de penRed per a ser utilitzat en combinació amb altres codis MC.

En conjunt, aquests objectius constitueixen una contribució a l'avançament de la investigació en el que a simulació MC es refereix, aplicada a l'àmbit de la física mèdica.

I.2 Radiacions ionitzants i la seua aplicació en física mèdica.

Les radiacions ionitzants s'empren en la rutina clínica en hospitals arreu del món, tant per a diagnosticar com per a tractar diverses malalties. És ben sabut que l'exposició a les radiacions pot ser perjudicial, però el seu ús està justificat en aquelles situacions clíniques en les que el benefici supere el perjudici, sempre tenint en compte els tractaments alternatius equivalents disponibles, i els factors socials i econòmics [44].

En aquesta secció es descriuran els conceptes fonamentals de les radiacions ionitzants aplicades a la física mèdica, incloent tant les magnituds més rellevants, així com les diverses fonts de radiació que constitueixen la base per als treballs presentats en aquesta tesi.

I.2.1 Dosimetria de les radiacions en física mèdica.

I.2.1.1 Conceptes fonamentals.

Tal i com es descriu a [45], la dosimetria es refereix a la mesura de la dosi absorbida, o la taxa de dosi resultant de la interacció de la radiació ionitzant amb la matèria. En el cas concret de la física mèdica, la dosimetria es refereix a la radiació absorbida, pels teixits humans, produïda per dispositius mèdics. Esta, és essencial per garantir la seguretat i l'eficàcia de diverses tècniques i procediments, com ara la radioteràpia i el diagnòstic per imatge.

Per una banda, en la radioteràpia, es requereix calcular i administrar amb precisió la radiació destinada als teixits objectiu (com ara els tumors) per destruir les cèl·lules malignes, minimitzant alhora l'impacte als teixits sans adjacents. D'altra banda, en diagnòstic per imatge, es pretén impartir la menor dosi de radiació possible, és a dir, que siga suficientment elevada per obtenir imatges de qualitat, però que no exposen excessivament els pacients a la radiació. En ambdós cassos, es requereixen càlculs dosimètrics per tal d'assegurar cadascun dels objectius.

Per tant, la dosimetria de les radiacions en física mèdica és una disciplina crucial per garantir un ús adequat, i segur, de les radiacions ionitzants en el camp de la salut.

I.2.1.2 Mesura de la radiació: magnituds i unitats dosimètriques.

Per determinar la quantitat d'energia dipositada en un medi donat deguda a les radiacions ionitzants, ja siguen directes o indirectes, s'han definit diverses quantitats i unitats de mesura al llarg de la història. A continuació, es descriuran breument les magnituds més comunes i les seues unitats [45, 46, 47].

- Fluència (Φ) i fluència energètica (Ψ)

La fluència ve definida pel quocient dN per dA , Equació I.1, on dN és el nombre de partícules incidents, entre dos temps t_0 i t_1 arbitraris, en una esfera definida al voltant del punt de mesura del camp de radiació, de secció transversal dA .

$$\Phi = \frac{dN}{dA} \quad [m^{-2}] \quad (\text{I.1})$$

En aquesta definició s'empra la secció transversal d'una esfera per expressar que es considera un àrea dA perpendicular a la direcció de cada partícula, de tal forma que la fluència de partícules és independent de l'angle d'incidència de la radiació.

La fluència energètica segueix una expressió anàloga, però, en aquest cas, el numerador es correspon amb l'energia incident. Tal i com es mostra a l'Equació I.2, ambdues magnituds estan relacionades, per mitjà de l'energia de la partícula, E .

$$\Psi = \frac{dE}{dA} = \frac{dN}{dA}E = \Phi E \quad [Jm^{-2}] \quad (I.2)$$

Cal tindre en compte que en la majoria de casos realistes, els feixos en la rutina clínica són feixos polienergètics. En eixe cas, les expressions anteriors són substituïdes per espectres de fluència de partícules, Equació I.3, i espectres de fluència energètica de partícules, Equació I.4, respectivament.

$$\Phi_E(E) \equiv \frac{d\Phi}{dE}(E) \quad [m^{-2}] \quad (I.3)$$

$$\Psi_E \equiv \frac{d\Psi}{dE}(E) = \frac{d\Phi}{dE}(E)E \quad [Jm^{-2}] \quad (I.4)$$

Finalment, aquestes expressions es poden escriure també com a taxa de fluència i taxa de fluència energètica, si tenim en compte la variació de les magnituds en un interval temporal dt , com es mostra en les Equacions I.5 i I.6, respectivament.

$$\dot{\Phi} = \frac{d\Phi}{dt} \quad [m^{-2}s^{-1}] \quad (I.5)$$

$$\dot{\Psi} = \frac{d\Psi}{dt} \quad [Jm^{-2}s^{-1}] \quad (I.6)$$

- Energia Cinètica Alliberada per unitat de Massa, *Kinetic Energy Released per unit MAss* (KERMA)

Aquesta magnitud és aplicable únicament a radiacions indirectament ionitzant, com ho són els fotons i els neutrons. Es defineix com el valor esperat de l'energia transferida a les partícules carregades, per unitat de massa, en un punt d'interès, incloent l'energia de pèrdua radiativa de les partícules carregades, però excloent l'energia transferida d'una partícula carregada a una altra.

En el cas concret dels fotons, l'energia transferida es produeix en dos passos. Primer, el fotó transfereix energia a partícules secundàries carregades, electrons al cas que ens ocupa, a través de diferents interaccions. Després, aquestes partícules carregades transfereixen l'energia al medi a través d'excitacions atòmiques i ionitzacions. Per tant, el kerma es defineix com mostra a l'Equació I.7, on $d\bar{E}_{tr}$ és l'energia mitjana transferida de radiació indirectament ionitzant (fotons) a partícules carregades (electrons) en el medi, i dm , és la massa del volum infinitesimal on té lloc la transferència.

$$K = \frac{d\bar{E}_{tr}}{dm} \quad [Gy = J/kg] \quad (I.7)$$

La transferència d'energia dels fotons als electrons, pot ocórrer per mitjà de dos tipus d'interaccions:

- Interaccions per col·lisió: interaccions Coulombianes, amb electrons atòmics del medi, que resulten en una dissipació local d'energia com a ionització i excitació en, o prop de, la trajectòria de l'electró.
- Interaccions radiatives: aquelles que es produeixen amb el camp de força de Coulomb dels nuclis atòmics, i en les que es generen fotons per *bremstrahlung*. Aquests fotons són relativament penetrants en comparació als electrons, dipositant l'energia lluny de la trajectòria principal de la partícula carregada.

Així doncs, el kerma es pot dividir com s'expressa en l'Equació I.8, on K_{col} es refereix a la part del kerma deguda a interaccions per col·lisió, mentre que el K_{rad} es refereix al kerma per interaccions radiatives.

$$K = K_{col} + K_{rad} \quad (\text{I.8})$$

En el cas de considerar fotons monoenergètics, el K_{col} es relaciona amb la fluència energètica definida anteriorment, tal i com es mostra en l'Equació I.9, on $\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)$ correspon amb el coeficient d'absorció màssic d'energia pels fotons monoenergètics en el medi. Cal destacar que aquest coeficient depèn de l'energia i del material en el que es produeix la interacció.

$$K_{col} = \Psi \left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right) \quad (\text{I.9})$$

Per a feixos polienergètics, existeix una relació anàloga, però en la que s'utilitzen quantitats mitjanes en l'espectre. Per a un espectre de fluència energètica $\Psi_E(E)$, al punt d'interès, es pot emprar l'Equació I.10 per al K_{col} .

$$K_{col} = \int_0^{E_{max}} \Psi_E(E) \left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right) dE = \Psi \left(\frac{\bar{\mu}_{en}}{\rho} \right) \quad (\text{I.10})$$

Per últim, es pot definir també la taxa de kerma, Equació I.11, si considerem la seua variació en un cert interval de temps dt .

$$\dot{K} = \frac{dK}{dt} \quad [Gys^{-1}] \quad (\text{I.11})$$

- Dosi absorbida (D)

És una quantitat que s'aplica a radiacions tant directa com indirectament ionitzants, i es defineix com el valor esperat d'energia impartida a la matèria per unitat de massa en un punt, tal i com expressa l'Equació I.12.

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm} \quad [Gy] \quad (\text{I.12})$$

Sota certes condicions, la dosi absorbida, es pot relacionar amb algunes de les magnituds definides anteriorment. Per relacionar-ho amb la fluència d'electrons, s'ha d'acomplir que els fotons produïts escapen del volum d'interès, i que els electrons secundaris siguin absorbits localment o que aquests es troben en Equilibri de Partícules Carregades (EPC). Aquest equilibri, existeix en un volum V , si cada partícula carregada

que ix del volum, d'un tipus i una energia determinats, és reemplaçada per altra que entra, del mateix tipus i energia. Sota aquestes dues condicions, la dosi absorbida es pot expressar com en l'Equació I.13, on $\left(\frac{S_{col}}{\rho}\right)$ és el poder de frenada per col·lisió per als electrons a una energia determinada.

$$D = \Phi \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right) \quad (\text{I.13})$$

Com que els electrons pateixen una desacceleració al interaccionar en un medi, existirà sempre un espectre de fluència que comprèn electrons des de l'energia cinètica inicial E_k fins a zero. Aquest espectre de fluència es denota per $\Phi_E(E)$. En eixe cas, l'expressió per a la dosi absorbida ve definida per l'Equació I.14, fent ús del poder de frenada per col·lisions mitjà espectral i de la fluència total.

$$D = \int_0^{E_{max}} \Phi_E(E) \left(\frac{S_{col}}{\rho} \right) (E) dE = \Phi \left(\overline{\frac{S_{col}}{\rho}} \right) \quad (\text{I.14})$$

D'altra banda, la dosi absorbida, es pot també relacionar, en el cas de feixos de fotons, amb el kerma sota condicions d'EPC. En aquest cas, s'acompleix la relació de l'Equació I.15, degut a que s'aproxima que els fotons radiatius, escapen del volum d'interès.

$$D \stackrel{EPC}{=} K_{col} \quad (\text{I.15})$$

I.2.2 Feixos de radioteràpia externa.

Els tractaments de radioteràpia, es divideixen principalment en dues categories: radioteràpia externa, com feixos generats per acceleradors, i interna, com la braquiteràpia. En aquest document, ens centrarem en la radioteràpia amb feixos externs, on la font de radiació es troba a una certa distància del pacient des d'on s'irradia el volum de tractament. Els feixos emprats en la pràctica clínica són de l'ordre del Megavoltatge, i es generen mitjançant acceleradors lineals mèdics, que es descriuran a les següents seccions. Depenent del tipus de lesió a tractar, la seua posició, estadi etc., s'empren feixos de diferents energia i partícules, així com l'accelerador adient en cada cas.

I.2.2.1 Acceleradors lineals convencionals, LinAcs.

En l'actualitat, els LinAcs són l'accelerador més comú en l'ús terapèutic, ja que són capaços tant de generar feixos de fotons com d'electrons de diferents energies, cobrint així les necessitats fonamentals de la radioteràpia externa. Els LinAcs es basen en l'acceleració de partícules carregades, típicament electrons, fins a energies cinètiques que varien de 4 a 25 MeV. Aquesta acceleració s'aconsegueix a través de guies d'ona, que utilitzen camps de radiofreqüència de microones a una freqüència aproximadament de 106 MHz. Al seu torn, els camps de radiofreqüència es generen mitjançant la desacceleració d'electrons en potencials retardats en dispositius coneguts com *Magnetrons* i *Klystrons*. Una vegada que els electrons han estat accelerats tal i com s'ha explicat, passen per un sistema de deflexió destinat a dirigir el feix cap a la taula de tractament. Aquest sistema, consisteix en una cavitat en la

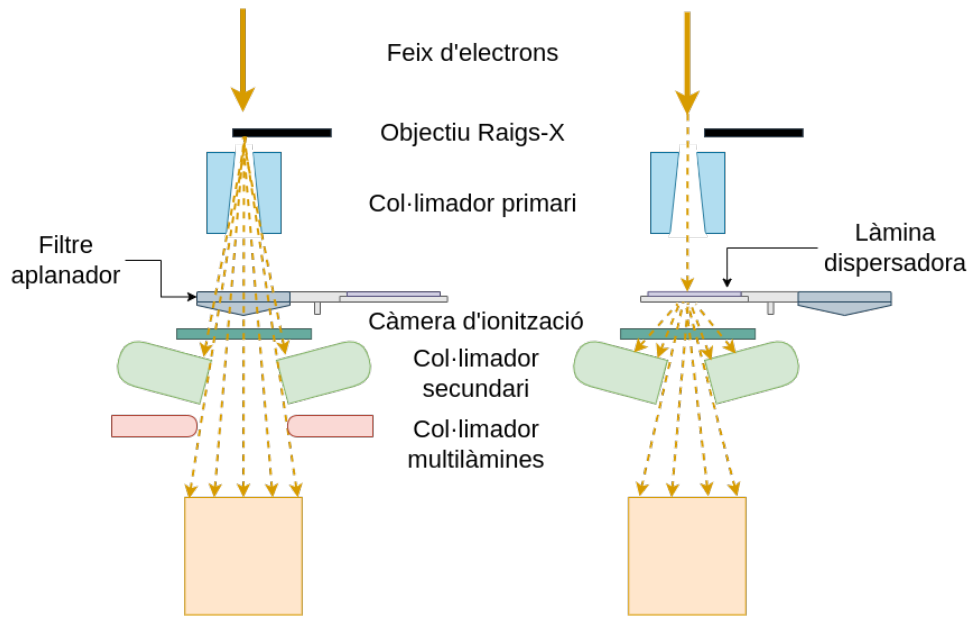


Figura I.3: Esquema general d'un accelerador lineal mèdic capaç de generar feixos de fotons (esquerra) o d'electrons (dreta) segons el mode de funcionament.

qual s'ha fet el buit i on existeix un camp magnètic transversal generat per electroimants.

A partir d'aquest punt, es consideren dos modes de funcionament del LinAc, depenent del tipus de feix que es desitja generar (fotons o electrons). L'esquema general de l'accelerador segons el mode de funcionament es mostra en la Figura I.3, tot i que aquest varia en funció de la casa comercial que fabrica el LinAc. Un accelerador modern típic, pot produir fotons d'energies de 6, 10, 15, 18 i 25 MV, i electrons de 6, 9, 12 i 15 MeV.

En el mode de tractament amb feixos de fotons, aquests es produeixen per radiació de *bremsstrahlung* o frenada. Això ocorre quan el feix d'electrons generat impacta contra l'objectiu, el qual es caracteritza pel seu elevat nombre atòmic, sent, generalment, de tungstè. Els fotons resultants passen després a través del filtre aplanador, per tal d'aconseguir uniformitat en el feix.

Per contra, en el mode de tractament amb feixos d'electrons, es retira l'objectiu i el filtre aplanador es substitueix per les làmines dispersadores, les quals dispersen el feix per aconseguir una certa apertura.

Tant els elements esmenats, com la resta d'elements del capçal, anomenats modificadors del feix, es descriuran a continuació amb més detall.

- Col·limador primari: aquest defineix, en el cas dels fotons, el major camp circular disponible. Consisteix en un element típicament de tungstè amb obertura cònica.
- Filtre aplanador: es caracteritza per ser un element metàl·lic, més gruixut a la zona central que a la perifèria. Aquesta configuració aconseguix homogeneïtzar el feix, ja que el feix dispersat provinent de l'impacte amb l'objectiu, té un perfil de fluència aproximadament gaussià, que podria afectar a la qualitat del tractament
- Làmines dispersadores: donat que el feix d'electrons generat inicialment, és altament

direccional, no seria útil per cobrir el volum objectiu de tractament. Per tal d'aconseguir que el feix tinga major utilitat terapèutica, es fa passar per aquestes làmines metàl·liques que dispersen el feix.

- Càmera d'ionització: la seua funció és monitoritzar i controlar la fluència energètica del feix resultant.
- Col·limador secundari: està format per quatre blocs que proporcionen camps quadrats o rectangulars. El sistema consisteix en dos blocs que formen les mordasses superiors, i que ajusten la mida del camp en un cert eix, i dos blocs que formen les mordasses inferiors, que ajusten la mida del camp en l'eix perpendicular a les superiors.
- Col·limador multilàmines, MLC: consisteix en un conjunt de diverses làmines que poden moure's independentment i proporcionar major flexibilitat a l'hora de generar una forma de camp irregular.

Cal assenyalar que els tractaments amb LinAcs, s'han de dur a terme en sales de radioteràpia adientment blindades, degut a les característiques del feix d'eixida generat.

Tot i que en part dels treballs desenvolupats en aquesta tesi, s'ha particularitzat per a un model de LinAc concret, el Varian Clinac 2100C, totes les eines desenvolupades es poden emprar o generalitzar per a qualsevol altre model d'accelerador.

I.2.2.2 Acceleradors mòbils de radioteràpia intraoperatòria IOeRT.

En els darrers anys, ha augmentat considerablement l'ús de Radioteràpia Intraoperatoria d'Electrons, *Intraoperative Electron Radiotherapy* (IOeRT), per a pacients amb càncer colorectal, ginecològic, sarcomes o de pit, entre altres [48]. Aquest tipus de tractament, ja era possible a partir de feixos generats amb LinAcs afegint, al feix, un sistema de col·limació específic [49, 50]. No obstant, el desenvolupament de dispositius mòbils dedicats, que poden introduir-se directament en les sales d'operacions convencionals sense necessitat d'un blindatge addicional, ha permès que aquesta modalitat s'haja estès en molts hospitals. Actualment, existeixen diferents cases comercials que ofereixen els seus dispositius de IOeRT. Entre ells destaquen *IntraOp Medical, Inc.* amb Mobetron, Hitesys SpA LT Italy amb Novac7 o *Sordina IORT Technologies (SIT)* amb el LIAC HWL. Algunes de les seues característiques i comparacions entre els dispositius es troben a la literatura [51, 52, 53].

En aquest document, descriurem únicament l'últim dispositiu esmenat, el LIAC, Figura I.2, en concret el que es troba a l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València, ja que és per al qual s'ha desenvolupat part del treball d'aquesta tesi. Les seues característiques més rellevants es mostren a continuació:

- Pot operar a quatre energies diferents: 6, 8, 10 i 12 MeV.
- Imparteix una taxa de dosi entre 5 i 20 Gy/min i una freqüència de pols entre 5 i 20 Hz [51, 52].
- Permet una càrrega de treball, en sales d'operacions estàndards sense blindatge, superior a 100 Gy/setmana segons l'estàndard NCRP 151 [54].
- S'ha dissenyat per minimitzar la radiació dispersa ($< 0,2 \mu\text{Sv}/\text{Gy}$ al pla del pacient a una distància de 3 m) [19].

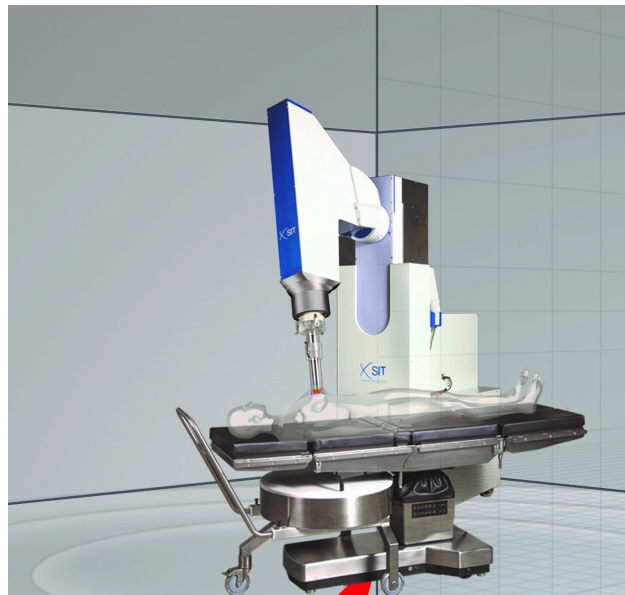


Figura I.4: LIAC HWL de Sordina. Imatge extreta de <https://www.soiort.com/liac-hwl/>

- És lleuger (< 400 kg) i relativament menut, pel que es pot utilitzar en sales d'operacions convencionals, ja que no necessita blindatge específic, com ja s'ha mencionat. Únicament necessita una barrera estructural per protegir les zones inferiors cap on apunta el feix, l'anomenat *beam stopper*.
- El capçal té tres graus de llibertat, pot moure's amunt i avall i una distància màxima de 100 cm, amb un angle de gir de $\pm 60^\circ$ i un angle d'inclinació entre -15° i 30° .
- El feix es pot col·lidir gràcies a aplicadors cilíndrics de PMMA:
 - longitud total de 40 cm.
 - diàmetres que van des de 3 fins a 10 cm.
 - diferents angles de bisell (0° , 15° , 30° , 45°).

I.2.2.3 Característiques dosimètriques dels feixos clínics.

En aquesta secció, es descriurà la deposició d'energia i dosi en el volum del pacient a irradiar, pels feixos produïts amb els dispositius de radiació externa esmenats.

Els paràmetres més rellevants que caracteritzen els feixos típics per a tractament es descriuen a continuació.

I.2.2.3.1 Distància Font Superfície, *Source Surface Distance (SSD)*.

Es defineix com la distància que separa la font de radiació que emet el feix, de la superfície del maniquí d'aigua o de qualsevol altre maniquí o pacient.

I.2.2.3.2 Mida del camp del feix de radiació (A).

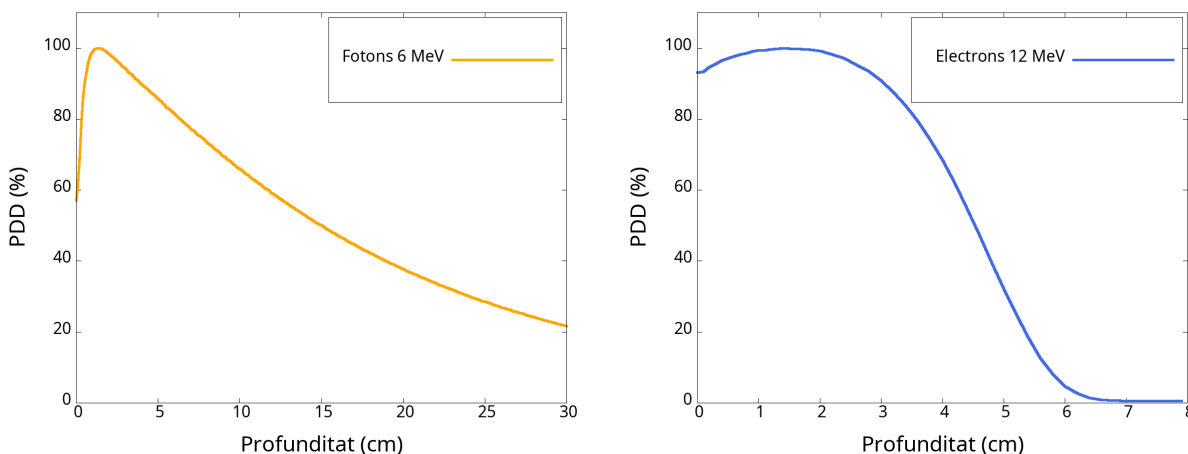
Generalment, els camps de radiació poden tindre forma quadrada, rectangular, circular o irregular. Aquesta forma i mida dependrà del tipus d'objectiu del tractament, i s'obté col·locant, adientment, els col·limadors o aplicadors, segons el cas. En el cas de forma irregular o adaptativa, s'empra el col·limador MLC. Aquesta A , sol expressar-se en cm^2 , donant la informació dels costats del quadrat o rectangle, i en cm si al cas d'un feix circular, on es proporciona el radi del mateix.

I.2.2.3.3 Corbes de dosi en profunditat.

Aquestes corbes, representen la distribució típica de dosi a l'eix central d'un feix, en funció de la profunditat en el maniquí d'aigua. És a dir, representen com s'atenua la radiació a mesura que aquesta penetra en el medi material. Alguns dels paràmetres que caracteritzen aquestes corbes, són, la dosi superficial D_s o la dosi màxima D_{max} . Aquests, dependran de l'energia del feix, de si el feix és de fotons o d'electrons, de la SSD i de la mida del camp. Típicament, aquests valors de dosi a l'eix central es normalitzen al valor màxim de dosi en dita distribució, D_{max} . Així, si $D_{max} = 100\%$, cadascun dels valors de dosi s'expressen en percentatge, i la corba resultant, és el que es coneix com la corba de Percentatge de Dosi en Profunditat, *Percentage Depth Dose* (PDD) del feix, Equació I.16. A part dels valors de D_{max} o D_s , per caracteritzar els feixos, es solen emprar els valors de dosi al 90% del màxim (D_{90}), o al 50% del màxim (D_{50}).

$$PDD(z, A) = 100D_z/D_{z_{max}} \quad (\text{I.16})$$

Un exemple d'aquestes corbes, es mostra en la Figura I.5, on es compara el comportament d'un feix de fotons generat per un LinAc amb un d'electrons de IOeRT. Ambdues corbes s'han obtingut a partir de dades proporcionades per l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe.



(a) PDD d'un feix de fotons de 6 MeV.

(b) PDD d'un feix d'electrons de 12 MeV.

Figura I.5: Exemples de PDD de fotons de 6 MeV a l'eixida d'un LinAc Varian (a) i un feix d'electrons de 12 MeV a l'eixida d'un aplicador de IOeRT (b). Dades proporcionades per l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València.

Al cas dels fotons, el feix entra en el maniquí amb una dosi superficial D_s , relativament menuda, entre un 30% i un 60% de la D_{max} . A partir d'eixe punt, la dosi augmenta fins a un

valor màxim, a una certa profunditat. Eixa profunditat s'anomena profunditat de màxima dosi z_{max} , a partir de la qual la dosi va disminuint paulatinament fins al punt d'eixida del maniquí, on pren un valor D_e .

Per contra, els feixos d'electrons produïts per acceleradors, presenten un comportament diferent. La PDD es caracteritza per una elevada dosi en superfície (comparada amb la mateixa en els feixos de fotons), que correspon aproximadament a un 75% - 95% de la D_{max} . Després, mostra un creixement suau fins a un valor màxim en z_{max} , i un ràpid decaïment de dosi fins a un valor menut anomenat cua de *bremstrahlung*.

En general, les diferències entre les PDDs de feixos de fotons i electrons, es poden sintetitzar en els aspectes següents:

- Els electrons mostren una D_s relativa major que els fotons.
- L'augment de dosi en la regió entre la superfície i el màxim de dosi és menys pronunciada en els feixos d'electrons.
- Després de D_{max} , la caiguda de dosi és lineal en profunditat, en el cas dels electrons, (abrupta en comparació amb la dels fotons) degut a la dispersió i la pèrdua d'energia contínua.
- Degut a les col·lisions inelàstiques amb elements del capçal i del pacient, es produeix una corba de *bremstrahlung* en els feixos d'electrons, mentre que la caiguda de dosi en fotons és paulatina.

En el cas especial dels feixos d'electrons de IOeRT, el fet d'haver d'afegir un aplicador com a sistema de col·limació del feix a l'eix de l'accelerador, juga un paper crucial. Degut a això, l'espectre d'energia s'eixampla encara més que en el cas de feixos produïts amb LinAcs, i genera un major nombre d'electrons dispersats en el feix, fins a un 30% més que en radioteràpia externa convencional [55]. Per eixe motiu les PDDs de IOeRT són lleugerament diferents a les dels feixos d'electrons produïts en LinAcs, tot i que mantenen el mateix comportament.

I.2.2.3.4 Perfils de dosi transversals al feix de radiació.

Tot i que les PDDs són essencials per a la caracterització del feix, proporcionen informació incompleta sobre la distribució de dosi dins del maniquí, ja que mostren únicament la distribució al llarg de l'eix central del feix. Per completar la caracterització del feix, es sol obtenir valors de dosi fora de l'eix mitjançant perfils del feix perpendiculars a l'eix central a una certa profunditat. Típicament, les profunditats a les que s'obtenen aquests perfils són, com a mínim, z_{max} i $z = 10$ cm, tot i que es solen obtenir també a $z = 5$ cm i $z = 20$ cm. A la Figura I.6, es mostra un exemple de perfils de dosi per a unes condicions de feix concret. Aquests perfils, es presenten també en percentatge, ja que les dosis relatives representen el quocient entre la dosi en un punt fora de l'eix, i la dosi en z_{max} .

Combinant la distribució de dosi a l'eix central i fora d'aquest, resulta una matriu de dosi volumètrica que proporciona informació del feix en 2D i 3D. A més, aquests perfils proporcionen informació sobre la simetria i homogeneïtat del feix.

Tal i com s'observa en la Figura I.6, als perfils poden diferenciar-se tres regions: central, ombra i penombra.

- Regió central: correspon a la regió des de l'eix central del feix, fins a 1 – 1.5 cm de les vores geomètriques del camp. És la zona il·luminada o de feix directe.

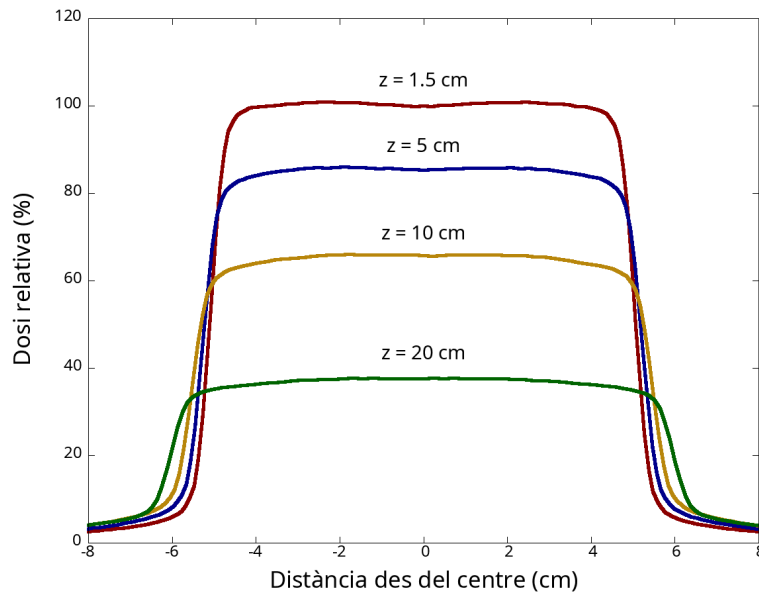


Figura I.6: Exemple de perfils de dosi transversal relativa en aigua a diferents profunditats, per a un feix de 6 MeV i un camp de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, produït per a un LinAc Varian. Dades proporcionades per l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València.

- Regió de penombra: es caracteritza per un canvi bruscat de la dosi. Aquesta disminució de dosi es produeix al voltant del marge geomètric del feix, que té forma sigmoïdal.
- Regió d'ombra: regió fora del camp de radiació, allunyada dels marges del camp. La dosi ací és baixa o pràcticament nul·la.

I.2.2.3.5 Simetria i homogeneïtat del feix.

La simetria del feix, S , es defineix com el grau de similitud del perfil del feix respecte a l'eix central. Llavors, S es calcula segons l'Equació I.17, on es consideren les àrees sota el perfil del feix a z_{max} , a dreta i esquerra de l'eix central, fins a la línia del 50% de dosi.

$$S = 100 \times \frac{A_{esquerra} - A_{dreta}}{A_{esquerra} + A_{dreta}} \quad (\text{I.17})$$

Per a aquest paràmetre, els protocols estableixen un valor òptim de simetria del feix del 3% [56].

D'altra part, la homogeneïtat del feix, F , es calcula a partir dels valors extrems de dosi, D_{max} i D_{min} , al perfil del feix, dins del 80% central de la seua amplada. El valor d' F , s'obté a partir de la relació mostrada en l'Equació I.18. Les especificacions estàndards dels protocols dels LinAcs, estableixen que F ha de ser menor al 3% [57].

$$F = 100 \times \frac{D_{max} - D_{min}}{D_{max} + D_{min}} \quad (\text{I.18})$$

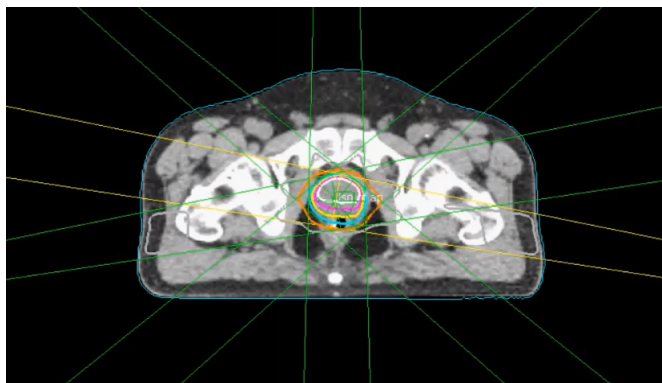


Figura I.7: Exemple d'irradiació amb 5 feixos, cadascun impartit des d'una posició angular diferent. Imatge obtinguda amb planificador de radioteràpia PLUNC per a un cas d'irradiació de pròstata.

I.2.2.4 Tipus de tractaments amb radiació externa, planificació i avaluació de dosi a teixits sans i objectiu.

Com ja s'ha esmenat, existeixen diferents tipus de tractaments que involucren radiació. Per decidir quin és el més adient, s'ha de tindre en compte la localització, extensió i estadi de la lesió, estat del pacient i possibilitats de tècniques de tractament, entre altre factors. Al cas on la radioteràpia externa siga el tractament més adequat, es pot diferenciar entre radioteràpia amb LinAcs convencionals, o tractaments amb accelerador mòbil de IOeRT, produint, cadascun d'ells, els feixos amb les característiques descrites anteriorment.

I.2.2.4.1 Tractaments amb LinAcs convencionals.

Discutint en primer lloc els tractaments amb LinAcs, en general, s'utilitzen quan es donen les següents situacions: bé per eliminar la massa tumoral o reduir la seua mida abans d'una cirurgia d'extracció, o bé per alleujar dolors i símptomes en càncers avançats, quan el tumor causa obstruccions o afectacions a altres òrgans produint dolors. La finalitat al primer cas, és contribuir a la cura de la malaltia, mentre que al segon, és millorar la qualitat de vida dels pacients. Cal assenyalar que els tractaments descrits es solen dur a terme, de vegades, en combinació amb altres teràpies com la cirurgia, la quimioteràpia o la immunoteràpia, entre altres.

Una de les característiques principals d'aquest tipus de tractaments, és que s'empren, comunament, més d'un feix de radiació. Cadascun s'imparteix des d'una posició angular diferent, o, el que és el mateix, des d'una orientació del capçal diferent. Açò es deu, principalment, a l'interès per aconseguir una distribució de dosi uniforme dins del volum objectiu, i una dosi tan baixa com siga possible, en els teixit sans propers [58]. Un exemple es mostra en la Figura I.7.

Abans d'impartir el tractament, s'han de seguir els passos mostrats en la Figura I.8 i que es descriuen a continuació [59, 60].

- **TC de simulació:** una vegada diagnosticada la lesió, es realitza un TC per a la simulació de tractament. sobre el TC es du a terme la localització espacial del tumor, identificant la seua forma, i també la localització dels òrgans i teixits sans veïns a protegir durant el tractament. És el que es denomina com a contorneig de les estructures d'interès.

- **Planificació:** amb la informació obtinguda del pas anterior, es decideix la dosi necessària de tractament (prescrita), la seua durada i la orientació i mida precisa del feix o els feixos que el conformaran. Açò permetrà avaluar la distribució de dosi resultant, i calcular i determinar quins són els paràmetres adients del LinAc per tal d'impartir la dosi requerida. Aquest procés determina la tècnica i feixos més òptims per acomplir amb els objectius dosimètrics establerts. El càlcul dosimètric de la planificació del tractament amb el dispositiu i pacient corresponent, es repeteix de forma iterativa fins aconseguir la distribució de dosi prescrita, tenint en compte les característiques tant del pacient, com del LinAc considerat.
- **Control de la qualitat del feix:** ja que en molts casos el tractament es du a terme en diferents sessions espaiades en el temps, és necessari que la calibració dosimètrica de la unitat de tractament, siga correcta. Així doncs, s'assegura que la dosimetria obtinguda en planificació, és la que efectivament rebrà el pacient durant el tractament. Si el tractament requereix tècniques avançades, es realitza una mesura experimental amb el pla calculat, per tal de garantir que aquest s'imparteix tal i com ha estat planificat. En el cas d'emprar tècniques de tractament conformades tradicionals, no es requereix aquesta verificació i es considera que amb els controls de qualitat periòdics del feix, el tractament s'imparteix de forma segura.
- **Administració:** una vegada s'han establert els paràmetres de tractament per oferir la dosi prescrita, es trasllada el pacient a la sala de radioteràpia. Aquesta sala, consta d'una sèrie de blindatges i compleix els protocols de construcció, per tal de garantir que el tractament impartit no afecte a les persones que es troben en sales col·lidants. Típicament, el tractament s'administra de forma fraccionada, és a dir, en diferents sessions durant un interval de temps de l'ordre de setmanes. Per tal de que el tractament es duga a terme de la manera més precisa possible, és fonamental comprovar que la posició del pacient coincideix amb aquella amb la que s'ha realitzat la planificació i simulació. En aquest punt, és habitual obtenir imatges de control.

Un aspecte fonamental a tindre en compte, són les incerteses inherents al càlcul durant la planificació i simulació, i s'ha d'assegurar, que la suma de totes elles, no supere el 5% de la dosi prescrita [61]. Aquest percentatge seria la tolerància del tractament. A més, la planificació inicial no és estàtica, ja que l'equip clínic especialista la pot ajustar segons les necessitats del pacient i la seua evolució i els efectes secundaris mostrats.

I.2.2.4.2 Tractaments amb acceleradors mòbils específics per a IOeRT.

Continuant amb l'altre tipus de dispositius, la IOeRT és una modalitat de tractament que es du a terme en el mateix moment que la cirurgia d'extracció del tumor, aplicant una única irradiació, d'uns 20 Gy, al llit tumoral. Degut a les seues característiques, els tractaments tenen lloc en quiròfans convencionals, sense necessitat de desplaçar al pacient a una nova ubicació, evitant així tots els problemes d'esterilització que això comporta [18].

Aquesta tècnica, s'aplica en exclusiva o en combinació amb radioteràpia externa fraccionada, descrita anteriorment.

Com que aquesta modalitat de tractament es realitza a través de la incisió creada per a l'extracció de la massa tumoral, permet, als professionals clínics, realitzar una demarcació visual i palpable de la regió objectiu. Per tant, és possible posicionar el feix just en la

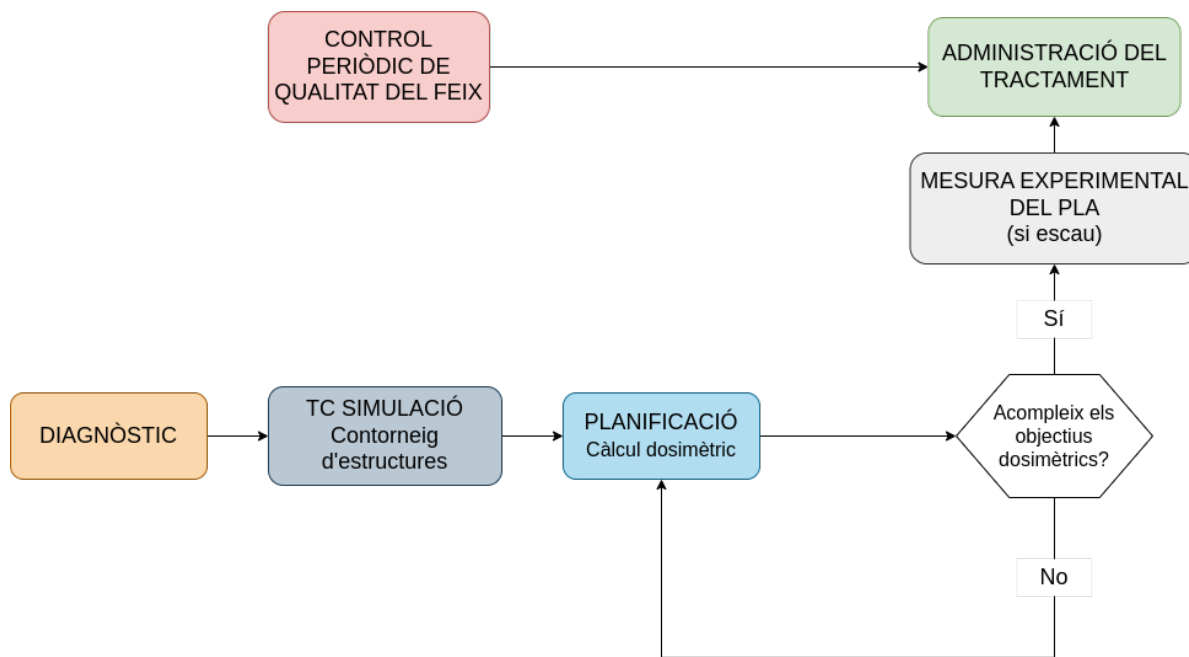


Figura I.8: Esquema de les fases del procés de tractament amb radioteràpia externa amb LinAcs convencionals.

zona a irradiar. A més, es poden desplaçar del camp directe d'irradiació, algunes de les estructures més sensibles, així com incloure certs blindatges a l'interior del pacient, els quals, proporcionen protecció a teixits i òrgans de risc [62, 63, 48].

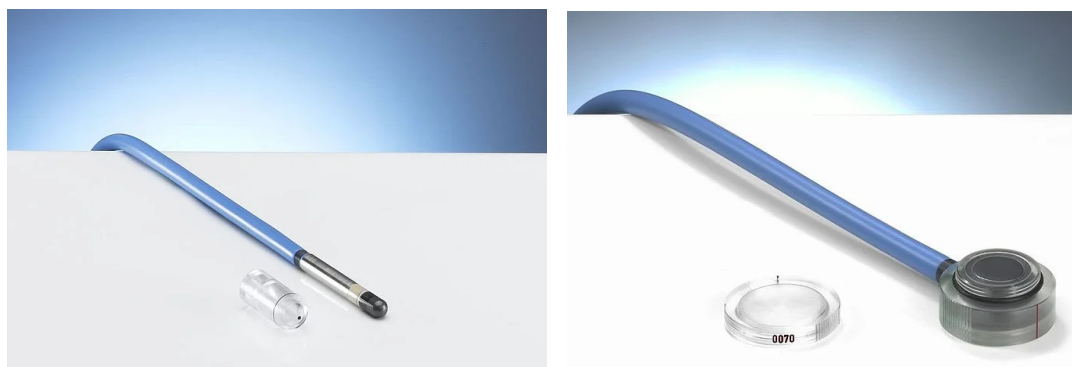
Tot açò permet augmentar la dosi, sense augmentar les complicacions en teixits sans o normals, resultant en una millora de la relació terapèutica [15, 64].

La planificació dels tractaments IOERT, és molt més complexa que en el cas de radioteràpia convencional. Un dels grans problemes per obtenir un planificador precís, deriva de la impossibilitat intrínseca d'aprofitar les imatges de diagnòstic preoperatòries, degut a que durant el procés es modifica de forma substancial, l'anatomia de la regió a tractar. Un altre fet que complica la planificació, és que els blindatges utilitzats són de materials amb un elevat nombre atòmic, el que afecta a la distribució de dosi [65, 66, 67]. A més, part de l'aplicador s'introdueix uns centímetres dins del pacient, modificant encara més la seua anatomia.

La manca d'un sistema de planificació específic per a IOERT precís i fiable, s'ha considerat com una de les limitacions d'aquest tractament respecte als de radioteràpia convencional. Tot i això, s'han desenvolupat alguns planificadors oferint diferents solucions a aquest problema [68, 69]. No obstant, l'avantatge d'aquesta modalitat de poder identificar visualment l'objectiu a tractar, sense necessitat d'imatge diagnòstica en temps real ni planificació, ofereix, en general, suficient informació als professionals sanitaris per dur a terme el tractament, sempre coneixent amb detall les característiques del feix d'electrons.

I.2.3 Instruments de mesura de dosi.

Al llarg d'aquesta tesi, s'han realitzat comparacions entre resultats simulats i mesures experimentals, obtingudes a l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València, per professionals



(a) Semiflex Ionization Chamber 31010 de PTW. (b) Advanced Markus® Electron Chamber de PTW.

Figura I.9: Exemples de càmeres d'ionització de la marca PTW: càmera cilíndrica (a) i càmera pla paral·lela (b).

amb els quals s'ha col·laborat. És per això que, en aquesta secció, es descriuran breument els instruments emprats per dur a terme dites mesures.

I.2.3.1 Càmeres d'ionització.

Estan dissenyades per mesurar la quantitat de radiació ionitzant, en termes de càrrega elèctrica, generada pels electrons i ions alliberats per la radiació. La mesura es realitza en el denominat “volum actiu” del dispositiu, el qual sol estar tancat hermèticament. L'esmenat volum, està ple d'aire o gas, i té dimensions entre 0.02 i 0.6 cm³ en el cas del seu ús en radioteràpia.

El seu principi de funcionament és el següent: quan un feix de radiació ionitzat travessa el volum actiu, interacciona amb el gas al seu interior, ionitzant els seus àtoms i alliberant electrons i ions. Aquests, es desplaçaran cap als elèctrodes de la càmera produint un corrent elèctric. Com que la quantitat de càrrega està directament relacionada amb la deposició d'energia, aquest instrument proporciona mesures de la radiació del feix.

Les càmeres es poden col·locar a l'interior dels maniquins d'aigua, per realitzar mesures de quantitat de radiació del feix, i poder obtenir així les corbes de dosi que defineixen aquests feixos, com les PDDs o els perfils de dosi transversals.

Un parell d'exemples de càmeres de la marca PTW¹, els podem veure a la Figura I.9. En I.9a, es mostra una càmera cilíndrica, en concret la *Semiflex Ionization Chamber 31010*, que es una càmera estàndard per a fer mesures de dosimetria de referència. Mentre que en I.9b, es mostra una càmera pla paral·lela, la *Advanced Markus® Electron Chamber*, que s'empra per a mesures d'electrons d'alta energia.

I.2.3.2 Díodes.

La quantitat de radiació que hi arriba a un punt d'interès, es pot mesurar també amb díodes dosimètrics. Aquests, són dispositius semiconductors que registren la quantitat de radiació rebuda per mitjà de canvis en les seues propietats elèctriques. Quan la radiació incideix sobre el material semiconductor, Silici en la majoria dels casos, l'ionitza generant parells electró-forat. Els electrons alliberats i els forats generats, contribueixen a la corrent elèctrica

¹<https://www.ptwdosimetry.com/en/>



Figura I.10: Detector INOVION 451 de Fluke Biomedical, USA. Mesures de dosi perifèrica per a un LIAC HWL de Sordina, a 3 m del feix de radiació a l'Hospital La Fe de València.

del díode, de tal forma que la quantitat de corrent generada pel pas de la radiació dona una mesura de la dosi, ja que és proporcional a aquesta. El seu ús d'aplicació és similar al de les càmeres d'ionització, és a dir, s'empren per a verificar i mesurar la dosi deguda a la radiació que arriba al volum sensible del dispositiu. A més, com les càmeres, es poden col·locar en diferents posicions a l'interior del maniquí, per tal d'avaluar la distribució espacial de la dosi. El principal avantatge d'aquests front a les càmeres, és que són més compactes, el seu volum actiu es típicament menor a 1 mm^3 , poden tindre una resposta ràpida i són adequats per a mesures puntuals i en temps real.

Per a prendre les mesures, tant les càmeres com els díodes s'acoblen a un electròmetre que mostrarà els valors mesurats.

I.2.3.3 Pel·lícules radiocròmiques.

Es tracta de pel·lícules fines de materials, que experimenten un canvi en el seu color quan s'exposen a la radiació ionitzant. Solen estar construïdes amb polímers amb colorants radiocròmics, i són fines i flexibles. El canvi de color és degut a alteracions en l'estructura molecular del material, produït pel pas de la radiació. Com que el canvi de color és proporcional a la quantitat de dosi absorbida pel material, les pel·lícules poden emprar-se per a mesurar i visualitzar la distribució de la dosi.

I.2.3.4 Monitors ambientals.

Els monitors ambientals, permeten realitzar mesures ràpides de la radiació ionitzant en un àrea determinada. Són detectors que permeten mesurar dosis a una certa distància del camp de radiació, sent essencials per a la protecció radiològica en diversos entorns, entre ells en instal·lacions mèdiques. Un exemple d'aquest tipus de detector es mostra a la Figura I.10.

I.2.3.5 Llistat d'instruments de mesura emprats.

Als treballs presentats a aquesta tesi, les mesures experimentals s'han dut a terme amb els següents instruments:

- *Advanced Markus* tipus 34045, PTW
- *Semiflex 31010*, PTW
- *Thimble Chamber*, PTW
- *E diode* tipus 60017 i 60012
- *T10008 Unidos electrometer*, PTW
- *GAFChromic EBT3 film*, Ashland Inc., Bridgewater, NJ, USA²
- *INOVISION 451 survey meter*, Fluke Biomedical, USA³.

²<http://www.gafchromic.com/>

³<https://www.flukebiomedical.com/>

I.3 Mètode de Monte Carlo en aplicacions de física mèdica.

L'interès per estudiar el transport de radiació a través de la matèria, s'ha fet palès des de principis del segle XX. Inicialment, l'estudi del transport de la radiació es va descriure mitjançant un corrent determinista basat en l'equació lineal de transport de Boltzmann. En termes generals, aquesta consisteix en la construcció d'un model mitjançant un sistema acoblat d'equacions lineals, conegudes com les lleis de Boltzmann, que descriuen el transport de les partícules en un determinat medi material. Aquesta estratègia funciona correctament en medis homogenis, però presenta algunes limitacions, per exemple, quan les partícules es transporten a través de medis heterogenis [70]. Per eixe motiu, a finals del 1950, es van desenvolupar mètodes de Monte Carlo com una estratègia alternativa per a poder resoldre els problemes de transport de la radiació.

I.3.1 Definició del mètode de Monte Carlo i evolució històrica.

Tot i que es poden trobar diferents definicions del mètode MC, pot considerar-se com una de les més precises la proposada per Halton en 1970 [71]:

El mètode de Monte Carlo és un mètode que intenta trobar la solució d'un problema d'estimació d'un paràmetre d'una població hipotètica, per mitjà de nombres aleatoris per tal de construir una mostra de la població a partir de la qual es dedueix dit paràmetre.

En general, es pot considerar com a mètode MC qualsevol mètode que empre nombres aleatoris.

El terme Monte Carlo va ser emprat per primera vegada en la dècada dels 40, per científics que utilitzaven mètodes numèrics, basats en l'ús de nombres aleatoris, per al desenvolupament d'armes nuclears. A partir d'eixe moment i fins l'actualitat, el mètode s'utilitza en nombroses àrees científiques i tecnològiques per resoldre diferents problemes matemàtics i físics complexos [72]. La simulació de MC es realitza, generalment, amb ordinadors, ja que el nombre d'intents necessaris per descriure adequadament el fenomen sol ser elevat. Gràcies a la potència de càlcul dels ordinadors actuals, les simulacions que empen mètodes de MC per a resoldre problemes complexos, s'han estès considerablement.

Un dels problemes als quals es pot aplicar aquest mètode, és a la resolució de problemes de transport de partícules, ja que els processos involucrats en el transport tenen natura estocàstica. La trajectòria de cada partícula, s'interpreta com una seqüència aleatòria de vols lliures que acaben amb una interacció. En aquesta, la partícula modificarà la seua direcció, perdrà una certa quantitat d'energia i, si escau, produirà partícules secundàries. Per tant, les simulacions de MC d'una configuració donada, consisteixen en la generació numèrica de trajectòries aleatòries de les partícules individuals. Cadascuna d'aquestes partícules inicials i les secundàries produïdes a partir de les interaccions que patirà al llarg del seu recorregut, es denomina com a història. La simulació de les històries es realitza a partir d'un model d'interacció, és a dir, un conjunt de Seccions Eficaces Diferencials, *Differential Cross Section* (DCS) per als diferents mecanismes d'interacció de les partícules, que es realitza aplicant les lleis físiques conegudes. Aquestes DCS determinen la Funció Densitat de Probabilitat, *Probability Density Function* de cada variable aleatòries que caracteritza una trajectòria. Finalment, conegudes aquestes funcions, les històries es generaran amb un mètode de mostreig

adient. Sempre que es generen històries suficients, es pot obtenir informació quantitativa del procés de transport, fent la mitjana de totes les històries simulades.

En la següent secció, es descriuen breument els conceptes bàsics del mètode MC, més detall es pot trobar en [73, 74, 75].

I.3.2 Conceptes bàsics.

Els mètodes de MC, tot i que s'apliquen a nombroses àrees del coneixement, en general, tenen un conjunt d'elements comuns que s'implementaran segons el problema que es vulga resoldre en cada cas. Aquests elements s'explicaran a continuació.

I.3.2.1 Generació de nombres aleatoris.

La base principal del mètode, és, idealment, ser capaç de generar seqüències de nombres aleatoris, de tal forma que cada nombre de la seqüència s'obtinga per atzar sense estar relacionat amb qualsevol altre nombre de dita seqüència. Com que aquests nombres han de ser generats per un ordinador mitjançant un algoritme numèric, els nombres generats seran, realment, pseudo-aleatoris [76]. Tot i no ser realment aleatoris, en el que al seu ús en mètodes de MC respecta, són indistingibles dels aleatoris vertaders, sempre que acomplisquen una sèrie de característiques:

- Aleatorietat: han de tenir la mateixa probabilitat de passar una prova estadística que els aleatoris vertaders (indistingibles entre ells).
- Període: al no ser aleatoris vertaders, la seqüència de nombres generats es repetirà després d'un cert nombre de generacions. Per evitar correlacions, el període ha de ser suficientment gran, major que la seqüència de nombres necessària per a resoldre el problema en qüestió.
- Eficiència: el generador ha de ser ràpid i ha de suposar un baix cost computacional i memòria de l'ordinador que el genera.
- Portabilitat: la seqüència exacta generada, ha de ser reproduïble per altre ordinador donada una llavor.

I.3.2.2 Mostreig de distribucions.

El mètode de MC ha de garantir que és capaç de mostrejar valors aleatoris seguint una certa distribució de probabilitat, és a dir, ha d'existir una correspondència entre els nombres aleatoris i les variables d'interès del problema per mitjà de les PDFs.

L'objectiu és generar valors aleatoris distribuïts segons una PDF, la qual es defineix positiva en tot el domini i normalitzada a la unitat. Siga $p(x)$ la funció densitat de probabilitat definida en l'interval $a \leq x \leq b$, la probabilitat d'obtenir x en un interval diferencial dx entre x_1 i $x_1 + dx$ ve donada per l'Equació I.19.

$$P(x | x_1 < x < x_1 + dx) = p(x_1) dx \quad (\text{I.19})$$

Donat que $p(x)$ és una distribució de probabilitat, es defineix la funció acumulativa associada $\mathcal{F}(x)$ de tal forma que represente la probabilitat d'obtindre un valor dins de l'interval

$[a, x]$, tal i com mostra l'Equació I.20. Com que $p(x)$ està normalitzada, els valors de $\mathcal{F}(x)$ estaran compresos en l'interval $[0, 1]$, sent $\mathcal{F}(a) = 0$ i $\mathcal{F}(b) = 1$. Per tant, $\mathcal{F}(x)$ serà necessàriament monòtona creixent i cada valor x amb probabilitat no nul·la es podrà associar inequívocament amb un valor de la funció acumulativa $\mathcal{F}(x)$.

$$P(X | X \leq x) = \mathcal{F}(x) = \int_a^x f(x') dx' \quad (\text{I.20})$$

Amb la definició anterior, la probabilitat d'obtindre un valor x dins d'un interval determinat es pot reescriure en termes de la funció acumulativa com es mostra a l'Equació I.21.

$$\begin{aligned} P(x | x_1 < x < x_2) &= \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' \\ &= \int_a^{x_2} p(x') dx' - \int_a^{x_1} p(x') dx' \\ &= \mathcal{F}(x_2) - \mathcal{F}(x_1) \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

Per tant, considerant un interval infinitesimal al voltant d' x , s'obté que la funció de densitat de probabilitat $p(x)$ es pot obtindre diferenciant la funció acumulativa (Equació I.22).

$$p(x) = \frac{d\mathcal{F}(x)}{dx} \quad (\text{I.22})$$

Tenint en compte les característiques de $\mathcal{F}(x)$, es pot definir la funció inversa $\mathcal{F}^{-1}(\xi)$ corresponent, on ξ és un valor definit en l'interval $[0, 1]$. Aquesta funció inversa permet obtindre el valor d' x associat a un valor ξ de la funció acumulativa, com mostra l'Equació I.23.

$$x = \mathcal{F}^{-1}(\xi) \quad (\text{I.23})$$

Considerant aleshores, ja que x és una variable aleatòria, ξ també com una variable aleatòria fruit de la transformació de l'Equació I.24,

$$\xi = \mathcal{F}(x) \quad (\text{I.24})$$

la seua funció acumulativa $\mathcal{F}_\xi(\xi')$ es pot obtindre com mostra l'Equació I.25,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\xi(\xi') &= P(\xi | \xi \leq \xi') \\ &= P(\mathcal{F}_x(x) | \mathcal{F}_x(x) \leq \xi') \\ &= P(x | x \leq \mathcal{F}_x^{-1}(\xi')) \\ &= \mathcal{F}_x(\mathcal{F}_x^{-1}(\xi')) \\ &= \xi' \end{aligned} \quad (\text{I.25})$$

on s'ha emprat el terme a l'esquerra de la igualtat de l'Equació I.20 per reescriure la probabilitat $P(x | x \leq \mathcal{F}_x^{-1}(\xi'))$ com la funció acumulativa \mathcal{F}_x . Finalment, podem obtindre $p_\xi(\xi')$ diferenciant la funció acumulativa (Equació I.22), obtenint que ξ segueix una distribució uniforme (Equació I.26).

$$p_{\xi}(\xi') = \frac{\mathcal{F}_{\xi}(\xi')}{\xi'} = 1 \quad \forall \xi' \quad (\text{I.26})$$

Per tant, mostrejant valors per a ξ uniformement distribuïts entre $[0, 1]$ i avaluant la funció $F^{-1}(\xi)$, s'obté una sèrie de valors per a x distribuïts segons la PDF $p(x)$, tal i com esquematitza la Figura I.11.

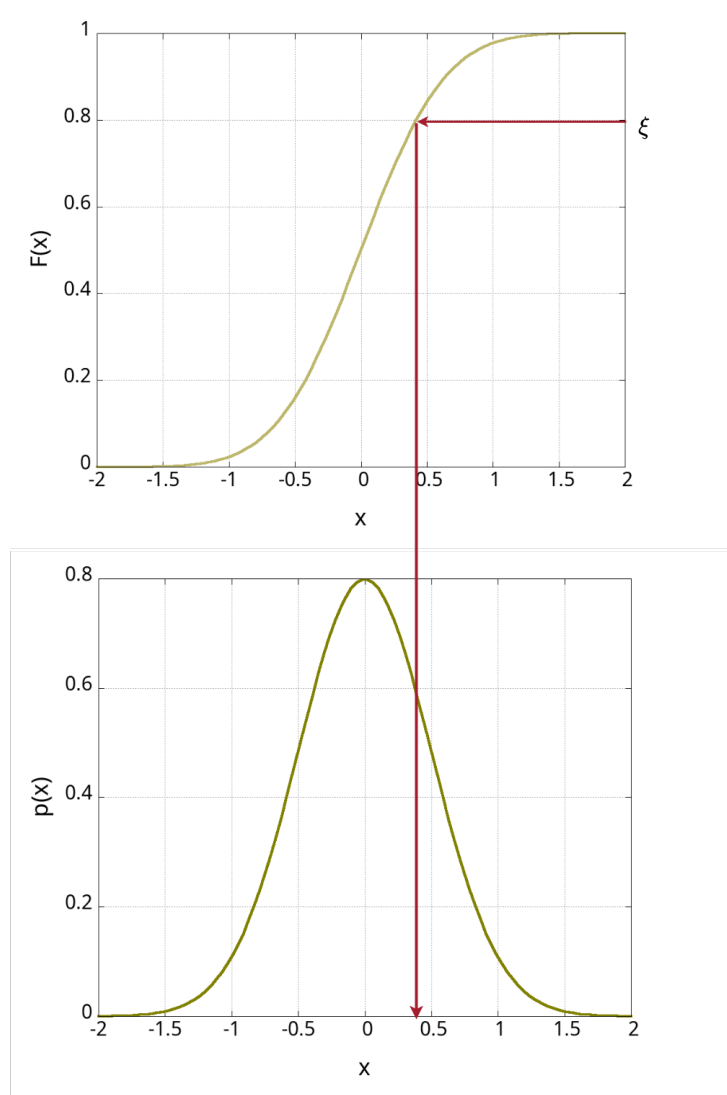


Figura I.11: Funció cumulativa $F(x)$ i la seua corresponent PDF $p(x)$, considerant ξ avaluada en un punt en l'interval $[0, 1]$.

Un exemple de distribució molt emprada a les simulacions de transport de radiació és la distribució exponencial, que modelitza la propagació i atenuació en un medi material.

Existeix la possibilitat de que la PDF esmenada no siga invertible, o si ho és, siga complexa. En eixe cas, per poder fer el mostreig s'ha de recórrer a tècniques de rebuig, mètode ideat per Von Neumann. La idea general és seleccionar una variable aleatòria i decidir si s'accepta o no mitjançant una prova. En aquest cas la PDF no ha d'estar necessàriament normalitzada, però l'eficiència d'aquest mètode és baixa.

I.3.2.3 Incerteses en la simulació Monte Carlo.

Degut a que el mètode MC és inherentment probabilístic, els resultats que proporciona tenen sempre associada una incertesa estadística. Aquesta, es coneix com incertesa de tipus A. Tal i com veurem en detall al llarg d'aquesta secció, en la simulació MC, la incertesa tipus A disminuirà a mesura que augmente el nombre d'històries simulades. D'altra banda, descriurem també la incertesa tipus B, la qual recull la contribució de fonts d'incertesa sistemàtiques i no es pot reduir augmentant el nombre d'històries simulades. Una font d'incertesa tipus B en el cas de simulacions MC, seria, per exemple, la construcció de la geometria sobre la que es desitja simular, ja que l'usuari podria interpretar erròniament algun element i introduir un error en la simulació que no disminuirà independentment del nombre d'històries que es simulen. Per detectar i minimitzar aquest tipus d'incertesa, és comú realitzar simulacions per duplicat amb codis diferents i grups de recerca independents.

I.3.2.3.1 Mitjanes i desviacions estadístiques de les mesures.

A la secció anterior, s'ha fet palès de la natura estadística del mètode MC, ja que la generació i transport de les partícules simulades venen regides per una sèrie de mostrejos seguint la PDF corresponent a cada cas. En conseqüència, les magnituds obtingudes de la simulació seran, al seu torn, variables aleatòries, amb un valor esperat i variància determinats.

Donada una funció resposta $q(x)$, que proporciona un valor de la magnitud a mesurar a partir d'un valor x determinat, es pot obtenir el valor mitjà de la mesura (Q) a partir de la PDF de la variable x , $p(x)$, tal i com mostra l'Equació I.27.

$$Q \equiv \langle q \rangle = \int q(x)p(x)dx \quad (\text{I.27})$$

Al seu torn, tenint en compte que la variància d'una magnitud es defineix segons l'Equació I.28, la variància associada a la magnitud q es defineix com mostra l'Equació I.29.

$$\text{var}(x) \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int (x - \langle x \rangle)^2 p(x)dx = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\text{I.28})$$

$$\text{var}(q) = \int q^2(x)p(x)dx - Q^2 \quad (\text{I.29})$$

Al context que ens ocupa, cada valor x , i per tant $q(x)$ s'obté simulant el que es coneix com una història, com ja s'ha introduït a la Secció I.3.1. Recordant aquest concepte, una història està conformada, en primer lloc, pel transport d'una partícula primària, la qual és generada per la font de partícules mostrejant el seu estat inicial segons unes PDFs determinades, com s'ha discutit a la Secció I.3.2.2. A més, la història inclou el transport de totes les partícules secundàries generades a partir d'aquesta i les seues descendents, que es produeixen com a conseqüència de la interacció de les partícules amb els medis materials. Finalment, la simulació de tot el conjunt de la història, és a dir, el transport de la partícula primària i totes les descendents, es coneix com a *cascada*.

Per posar un exemple concret, si el que es pretén mesurar, Q , és l'energia mitjana dipositada per història, la PDF, $p(x)$, no serà més que la probabilitat que una història dipositi una quantitat d'energia $q(x)$. Noteu que obtenir tant x com $p(x)$ explícitament és, en general, complex i seran desconeguts a priori. Aquestes, depenen del mostrejat de l'estat inicial de la partícula primària, de les seues probabilitats d'interacció en cada material simulat, del transport de totes les partícules secundàries, o del camí recorregut per les partícules abans

d'interaccionar, entre molts altres factors. Per tant, del que realment es disposa a partir de la simulació, és directament dels valors $q(x)$, els quals es poden construir a mesura que el transport de les partícules es simula. Per exemple, al cas anterior, registrant quan una partícula perd energia degut a una interacció.

Aleshores, per tal d'obtindre Q , la simulació genera una successió de variables pseudo-aleatòries x . a partir de la combinació de les diferents PDFs que regeixen la generació i transport de les històries o cascades, i la mesura $q(x)$ corresponent. Per tant, el que s'obté al finalitzar la simulació, és una distribució discreta de valors mesurats q , un per cada història simulada. Amb aquests, s'obté una estimació de la magnitud Q tal i com mostra l'Equació I.30, on q_i és el valor de la mesura de la història i -èssima i N és el nombre total d'històries simulades.

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad (\text{I.30})$$

Per la llei dels grans nombres, si N és suficientment gran, és clar que,

$$\bar{Q} \rightarrow Q \quad (\text{I.31})$$

No obstant, cal tenir en compte el fet que diferents execucions de la simulació MC, amb seqüències independents de nombres aleatoris, proporcionen diferents estimacions de \bar{Q} . Aquest fet implica que el resultat proporcionat per la simulació MC es veu afectat per incerteses estadístiques. Per tant, s'ha de considerar \bar{Q} com una variable aleatòria amb una PDF, en general, desconeguda, la qual tindrà associada un valor esperat i variància, donades per les Equacions I.32 i I.33 respectivament.

$$\langle \bar{Q} \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i^N q(x_i) \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle q \rangle = \langle q \rangle = Q \quad (\text{I.32})$$

$$var(\bar{Q}) = var \left[\frac{1}{N} \sum_i^N q(x_i) \right] = \frac{1}{N^2} \sum_i^N var(q) = \frac{1}{N} var(q) \quad (\text{I.33})$$

En ambdós casos s'han emprant propietats del valor esperat i de la variància. A partir d'aquesta última, s'obté, finalment, la incertesa estadística associada a la magnitud mesurada.

$$\sigma_Q = \sqrt{var(\bar{Q})} = \sqrt{\frac{var(q)}{N}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \bar{Q}^2 \right]} \quad (\text{I.34})$$

És important destacar que σ_Q és proporcional a $1/\sqrt{N}$, el que posa de manifest el desavantatge inherent del mètode MC, el seu alt cost computacional. Açò implica que, per reduir a la meitat la incertesa estadística, cal augmentar en un factor quatre el nombre original d'històries. No obstant, existeixen diferents tècniques per poder optimitzar les simulacions, tal i com es descriurà breument en la Secció I.3.4.

Tornant a l'exemple plantejat, l'energia dipositada mitjana en una simulació, vindria donada per l'Equació I.35, on e_i representa la suma de l'energia dipositada per totes les partícules de la cascada i -èssima.

$$\bar{E}_{dip} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i \quad (\text{I.35})$$

En aquest cas, la desviació estàndard vindria donada per l'Equació I.36, on es fa palès que, al llarg de la simulació, no sols s'ha d'emmagatzemar el sumatori dels valors e_i , sinó també el dels seus quadrats (e_i^2) per tal de fer una estimació correcta de la incertesa de tipus A, associada al valor obtingut de la simulació.

$$\sigma_{E_{dip}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2 - \bar{E}_{dip} \right]} \quad (\text{I.36})$$

Un cas d'especial interès per als treballs desenvolupats en aquesta tesi, és aquell en el qual es pretén mesurar una distribució continua de la magnitud en qüestió, com l'energia si mantenim l'exemple anterior. En eixe cas es discretitza la distribució i es considera com si d'un histograma es tractara. Per exemple, si es mesura l'energia dipositada per història al llarg de la profunditat d'un maniquí d'aigua, en un interval entre z_{min} i z_{max} , l'opció més senzilla és dividir la profunditat en n intervals regulars. Per realitzar la mesura tal i com s'ha descrit, es defineix la variable $e_{i,j,k}$, on el subíndex k correspon a l'interval espacial al llarg del maniquí, el j amb l'índex de partícula dins de la cascada i i amb la història. Així, l'energia dipositada en un cert interval, per una certa partícula, per història incident, ve donat per l'Equació I.37.

$$E_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_j e_{i,j,k} \quad (\text{I.37})$$

Redefinit el sumatori per a totes les partícules segons l'Equació I.38, es pot simplificar l'expressió per a l'energia dipositada com es mostra en l'Equació I.39.

$$e_{i,k} \equiv \sum_j e_{i,j,k} \quad (\text{I.38})$$

$$E_k \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,k} \quad (\text{I.39})$$

Finalment, la desviació estàndard corresponent, ve donada per l'expressió de l'Equació I.40.

$$\sigma_{E_k} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,k}^2 - E_k^2 \right]} \quad (\text{I.40})$$

El resultat de la mesura de l'energia dipositada sota aquestes condicions, és, aleshores, una funció discontinua amb un nombre finit de discontinuïtats, situades entre els n intervals en que s'ha dividit la profunditat del maniquí. Cal assenyalar que la mida d'aquests intervals juga un paper fonamental referent a l'eficiència de la simulació i la incertesa de la mesura. Si els intervals són molt menuts, en general, a cadascun es registrarà un nombre menut de mesures ($e_{i,k}$) augmentant així la incertesa estadística. A més, el nombre d'intervals serà gran, depenent evidentment de la mida d'aquests. Com a conseqüència, es requerirà major memòria per poder guardar l'acumulació de les mesures a cadascun dels intervals, així com els corresponents quadrats ($e_{i,k}^2$) necessaris per calcular la incertesa estadística. Tenint en compte açò, s'haurà d'arribar a un compromís entre el nombre d'intervals requerits, per obtenir mesures en suficients punts d'interès, i la velocitat de simulació, el que vindrà condicionat pel nombre i les característiques de les màquines on s'executa la simulació.

Tot i que a aquest exemple pot semblar irrellevant, s'ha de tindre en compte la quantitat de memòria necessària per al registre de les magnituds a mesurar. Si, per exemple, es necessita registrar una distribució espacial de dosi a una malla volumètrica, com pot donar-se el cas a una Imatge Digital i de Comunicacions en Medicina, *Digital Imaging and Communications in Medicine* (DICOM), l'ús de memòria pot arribar a ser un problema, sobretot si es paral·lelitzava la simulació, com es discutirà a la secció següent. Considerant una mida d'imatge mèdica típica de TC ($512 \times 512 \times 250$), l'ús de memòria requerit per calcular una única magnitud en cada element de la imatge és, aproximadament, de 1000 MB.

I.3.3 Geometries.

Una part fonamental de qualsevol simulació, és la definició de la geometria on es va a simular el transport de les partícules, i que depèn completament del problema que s'està estudiant. En qualsevol cas, el càlcul fonamental en el transport de les partícules a través del sistema, consisteix en calcular les interseccions d'aquestes amb els diferents elements que conformen la geometria. En general, cada codi de simulació proporciona un o més mètodes per definir les geometries, així com formats específics per als fitxers on es defineixen. No obstant, la majoria de mètodes es poden dividir en tres grans grups:

- **Objectes matemàtics:** aquest tipus de definició de geometria, és la més comuna en els diferents codis de simulació. Empra elements definits matemàticament i operacions booleanes per a crear objectes complexos, com, per exemple, superfícies quàdriques. L'avantatge principal d'aquest tipus de geometries, és que el cost computacional de calcular els punts d'intersecció de les trajectòries amb les superfícies dels diferents elements, és relativament baix, ja que cada element està conformat per un nombre reduït de superfícies. Com a contrapartida, ofereixen una flexibilitat limitada, donat que és complicat definir objectes complexos o amb formes irregulars, com teixits o òrgans. Més encara, la definició de geometries amb molts elements, com algunes càmeres d'ionització o acceleradors, pot resultar molt tediosa i és relativament senzill introduir errors durant la construcció [77]. Un exemple d'aquest tipus de geometria es mostra en la Figura I.12, on s'ha construït un model simplificat de tub de raigs-x, amb l'ànode, filtre, col·limadors i detector.

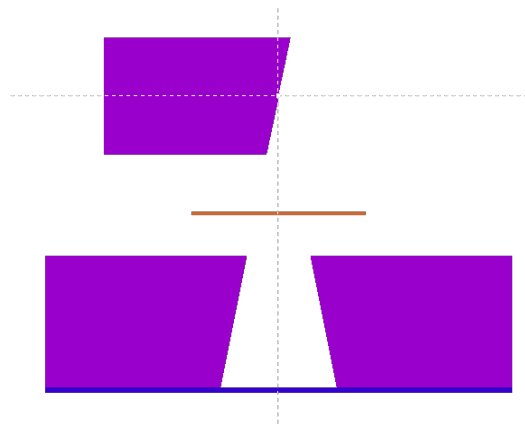
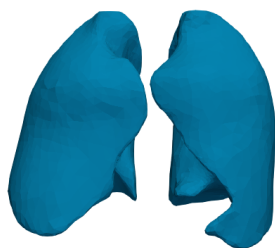
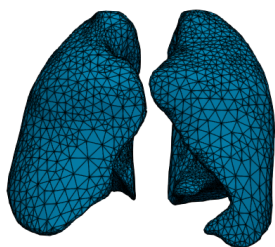


Figura I.12: Geometria d'un tub de raigs-x simplificat construïda amb objectes matemàtics. De dalt a baix: ànode, filtre, col·limadors i detector.

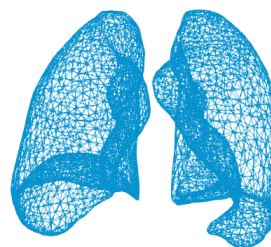
- **Mallats volumètrics:** en compte de definir superfícies o objectes, com la resta de tipus, els mallats volumètrics divideixen tot l'espai de simulació en elements de volum, on, en general, cadascun es pot definir amb un material i propietats físiques diferents. El problema principal d'aquestes geometries és que, generalment, requereixen una major quantitat de memòria, en comparació a la resta de tipus. A més, com que s'han de calcular les interseccions amb tots els elements de volum a mesura que la partícula avança, també requereixen un major cost computacional. No obstant, estes permeten modelitzar i definir geometries complexes de forma més senzilla, podent-se ajustar a formes irregulars. Podem distingir dos grans tipus:
 - **Regulars o estructurades:** es caracteritzen perquè tots els elements de volum són iguals, el que simplifica la localització de la partícula dins de la geometria i també el càlcul de les interseccions. Per contra, s'ajusten pitjor a superfícies amb curvatura i, en zones homogènies, es calculen interseccions innecessàries al no poder agrupar els elements de volum que comparteixen les mateixes característiques físiques. Un cas típic són els voxelitzats emprats en les imatges mèdiques DICOM.
 - **Irregulars:** En aquest cas, cada element de volum pot tindre una grandària i orientació distinta, el que permet ajustar-se molt millor a superfícies irregulars i elegir de forma més eficient la quantitat i mida dels elements de volum segons les característiques de la geometria. No obstant, en general, es requereix major quantitat de memòria, ja que és necessari guardar més informació de cada element de volum, i el cost computacional de calcular les interseccions per a cada element també és major, degut a la seua flexibilitat. Un exemple, es mostra a la Figura I.13. Concretament, en I.13a es representa, el volum complet mallat dels pulmons, mentre que en I.13b, es mostra el mateix volum però assenyalant els contorns dels elements que formen la malla i finalment, en I.13c, es mostra únicament el contorn de dits elements. Aquestes exemple, fa palès de la utilitat de les geometries mallades, especialment en aquelles estructures que tenen forma orgànica, pel seu elevat grau de definició.
- **Superfícies mallades:** l'últim tipus de geometria que es considerarà són les superfícies mallades. En aquestes geometries, de forma semblant als objectes matemàtics, es defineixen volums, o objectes, limitats per superfícies. No obstant, les superfícies estan formades per una malla d'elements poligonals, usualment triangles, de diferents mides i orientacions. Al igual que en les malles volumètriques, estes superfícies proporcionen un gran grau de flexibilitat, permetent ajustar tot tipus d'objectes irregulars i orgànics. A més, com que únicament es malla la superfície dels objectes, l'ús de memòria és, en general, menor que en els mallats volumètrics, tot i que major que en les geometries definides per objectes matemàtics. Pel mateix motiu, com que únicament s'han de calcular les interseccions amb les superfícies, sol requerir un menor cost computacional que les equivalents volumètriques. La contrapartida és que s'assumeix que el volum de cada objecte és homogeni, com als elements matemàtics. Per tant, si el problema a tractar presenta canvis de densitat o material continu al llarg del sistema, con trobem a les imatges DICOM, utilitzar este sistema implicaria definir un gran nombre d'objectes, el que no resulta pràctic. No obstant, a la majoria de simulacions no trobem aquesta limitació. Este tipus de tècnica és el que s'empra, entre altres, en els renderitzat d'animacions 3D i videojocs.



(a) Volum mallat.



(b) Volum mallat amb contorns dels tetraedres.



(c) Contorn dels tetraedres de la malla.

Figura I.13: Geometria corresponent als pulmons del maniquí antropomòrfic realista de la ICRP145 [78], amb diferents representació per poder apreciar la malla i la densitat d'elements per construir el volum mallat.

Cal remarcar, a més, que el procés de construir geometries mallades és molt més senzill de cara a l'usuari. Açò es deu a que existeixen multitud d'eines de programari especialitzat per dissenyar superfícies mallades tridimensionals, com pot ser Blender⁴ o FreeCAD⁵. Una vegada construïda, si necessitem una malla volumètrica, existeix també programari i llibreries per generar mallats a partir dels models CAD, com el programa Abaqus [79], entre molts altres.

Un altre punt clau a tenir en compte, és considerar els avantatges d'emprar formats estandarditzats en les geometries de les simulacions MC. Com ja s'ha introduït, la construcció de la geometria és un pas crucial en les simulacions i una font d'error no menyspreable, especialment en geometries complexes. Per eixe fet, aprofitar geometries en format CAD proporcionades pels fabricants de dispositius o per organitzacions que hagen validat dites geometries, és una avantatge que permet reduir la introducció d'errors en aquest pas. És per això, que emprar codis capaços de simular sobre aquest tipus de geometries, ofereix avantatges significatius en termes de consistència, comparabilitat entre resultats i validació dels mateixos. Les geometries proporcionades en formats estandarditzats, permeten que diferents grups de recerca puguin realitzar simulacions MC amb exactament el mateix model geomètric. Aquest fet, simplifica la comparació entre resultats i la reproductibilitats dels estudis en el que a la geometria respecta. La validació de resultats entre grups de recerca i codis de simulació diferents, és essencial per garantir la fiabilitat dels resultats, la qual cosa és d'especial importància en l'àmbit en el que s'emmarca aquesta tesi, específicament en estudis de dosimetria i radioteràpia.

⁴<https://www.blender.org/>

⁵<https://www.freecad.org/>

I.3.4 Optimització de les simulacions.

Com ja s'ha comentat al llarg d'aquest document, un dels punts clau per a la mesura de magnituds en simulacions MC, consisteix en arribar a un compromís entre la precisió dels resultats i el temps de càlcul. D'una banda, la incertesa de tipus A ha de ser suficientment menuda com per a assegurar la fiabilitat dels resultats, però reduir el seu valor requereix augmentar en ordres de magnitud les històries simulades. Açò, es tradueix en augmentar significativament els temps de càlcul, ja que aquest escala, típicament, de forma lineal amb el nombre d'històries. D'altra banda, estan les incerteses tipus B, que no es poden reduir augmentant el nombre d'històries. No obstant, com que aquestes incerteses són suficientment baixes, sempre i quan la simulació estiga ben configurada i el codi que s'empren s'ajuste al problema a resoldre, relaxar certs paràmetres de la configuració de la simulació, permet reduir significativament el cost computacional a costa d'augmentar aquest tipus d'incerteses, sempre que s'assegure que l'increment siga menyspreable. És per això que, al llarg de l'evolució dels codis MC, s'han desenvolupat i aplicat diferents tècniques per a intentar reduir els temps de càlcul de les simulacions. En aquesta secció es descriuran algunes de les tècniques més comunes per aconseguir aquest objectiu.

I.3.4.1 Energies de tall.

En general, els codis de simulació segueixen les trajectòries i transferència d'energia de les partícules involucrades en el problema, fins que l'energia arriba a uns certs valors lliars. Quan l'energia de la partícula es troba per sota d'aquest lliar, el codi interpreta que aquesta es diposita localment i el transport finalitza. Aquesta energia s'anomena energia de tall. Tot i que existeixen valors per defecte en tots els codis de simulació, l'usuari pot introduir, generalment, per a cada material i tipus de partícula involucrada en el problema, un nou valor lliar, optimitzant la simulació.

Triar el valor d'energia de tall no és una tasca senzilla. Augmentar el valor, reduirà significativament el temps de simulació, ja que, en general, es reduirà el nombre d'interaccions produïdes i de partícules secundàries generades. Però, també pot introduir errors en la mesura, ja que no s'estaran considerant interaccions i generació de partícules secundàries, que podrien ser significatives per al problema en qüestió. Per exemple, si es considera un cas extrem on es pretén mesurar la distribució d'energia dipositada en profunditat a un material, i es fixa l'energia de tall per sobre de l'energia inicial de les partícules, s'obindrà com a resultat que tota l'energia es diposita a la superfície del material, el que és erroni. No obstant, si l'energia de tall es fixa a un valor per al qual les partícules no son capaces de travessar un interval de mesura, el resultat no es veurà afectat de forma significativa. Per eixe motiu, és d'especial rellevància conèixer el problema que s'està tractant, i analitzar-lo en conseqüència. Açò, permetrà dissenyar simulacions eficients sense pèrdua de fiabilitat en els resultats.

Cal assenyalar que, tot i que en aquesta secció sols es descriuen les energies de tall, existeixen altres paràmetres que controlen la física del problema, i afecten a la velocitat de les simulacions. Com que aquests paràmetres difereixen segons el codi emprat, no s'entrarà en la seua descripció.

I.3.4.2 Tècniques de reducció de variància.

Aquestes tècniques, s'enfoquen en incrementar la eficiència de la simulació, de tal forma que es redueixen les incerteses estadístiques de la magnitud a mesurar, sense comprometre el

temps de simulació. Malauradament, aquestes tècniques depenen fortament de les condicions del problema, és a dir, no existeixen unes regles generals per a configurar-les. Per tant, és necessari estudiar cada cas concret i destinar un temps, en ocasions no menyspreable, a configurar la simulació adientment. És important tenir en compte que, aconseguir una disminució de la incertesa en una certa magnitud, pot ocasionar, en general, un augment de la incertesa d'altres magnituds del problema. Així doncs, l'ús d'aquestes tècniques s'ha de fer de forma controlada sense subestimar el seu efecte global.

Com s'ha discutit a la Secció I.3.2.3, el valor obtingut a partir de la simulació MC, és equivalent al càlcul de la integral que defineix el valor esperat de la quantitat d'interès,

$$\bar{Q} \simeq \int q(x)p(x)dx, \quad (\text{I.41})$$

i la variància corresponent ve donada per,

$$\text{var}_Q \simeq \int q^2(x)p(x)dx - \bar{Q}^2. \quad (\text{I.42})$$

El mètode emprat per reduir la variància, consisteix en reescriure l'integrand de les equacions anteriors. Al cas que ens ocupa, açò s'aconsegueix, típicament, assignant un pes w a cada partícula, el qual es va modificant a mesura que el transport avança. Afegint aquest pes, l'integrand es pot reescriure sense canviar el valor esperat com,

$$\bar{Q} = \int wq(x)\frac{p(x)}{w}dx = \int q'(x)p'(x)dx, \quad (\text{I.43})$$

on $q' = wq$ i $p' = p/w$. Amb aquesta transformació, la variància associada queda de la següent forma,

$$\text{var}'_Q = \int q'^2(x)p'(x)dx - \bar{Q}^2 = \int wq^2(x)p(x)dx - \bar{Q}^2. \quad (\text{I.44})$$

Per tant, amb una selecció convenient dels pesos w , és possible reduir la variància, simulant el mateix nombre d'històries, i mantenir el mateix valor esperat, tal i com es pretenia. És a dir, es possible augmentar l'eficiència de la simulació. No obstant, com s'ha mencionat, aquesta elecció dels pesos pot també augmentar la variància de les magnituds.

Algunes de les tècniques més emprades, presents a la majoria de codis de simulació, són la divisió (*splitting*) i la ruleta russa (*Russian Roulette*). La divisió, es refereix a dividir la partícula original amb pes w_0 entre k partícules filles amb pes $w_k = w_0/k$, de les quals es fa un seguiment independent. D'altra part, la ruleta russa segueix el procés contrari a la divisió. En aquest cas, per a una partícula que està eixint de la zona d'interès del problema, amb pes w_0 , es fa desaparèixer, amb una certa probabilitat. Així, la partícula no continua simulant-se i no contribueix a la mesura de la magnitud en qüestió. Si al aplicar la tècnica la partícula sobreviu, se li assigna un pes $w_1 > w_0$, segons la probabilitat de ser destruïda.

Aquestes dues tècniques es solen emprar conjuntament ja que, en termes generals, el seu objectiu és augmentar el nombre de partícules en les regions d'interès on s'avaluaran els resultats de la simulació, i disminuir-lo fora d'aquesta. Així, gran part del temps de simulació, es destina a simular el transport i interaccions d'aquelles partícules que contribueixen a la mesura de les magnituds en les zones d'interès. En contrapartida, és clar que les zones on les partícules són sotmeses a la ruleta russa, veuran incrementada la variància de les magnituds

mesurades.

Aconseguir que l'ús d'aquestes tècniques siga efectiu, dependrà dels coneixements sobre el problema, així com de l'experiència de l'usuari a l'hora de dissenyar la simulació i seleccionar els seus paràmetres.

I.3.4.3 Espais de fase.

Un altre mètode molt estès per optimitzar simulacions, consisteix en pre-calcular parts de la simulació comuns a diferents problemes, de forma que el càlcul pugui ser reutilitzat. Aquesta tècnica, té l'avantatge de no afectar negativament a la mesura d'altres magnituds, però, la reducció del temps de còmput ve lligada a la porció del problema que pugui ser reutilitzat.

Per exemple, en l'àmbit en el que es centra aquesta tesi, és usual que les simulacions utilitzin feixos generats per acceleradors. Una vegada el feix arribe a l'eixida del dispositiu, es farà incidir sobre diferents geometries i medis materials, com un maniquí d'aigua o antropomòrfic, o un o diversos pacients. Tal i com s'ha descrit en les seccions I.2.2.1 i I.2.2.2, generalment, els elements que conformen els dispositius generadors de feixos, romanen fixos durant tot el procés d'irradiació. Donat que la simulació del dispositiu es repeteix a multitud de problemes, es pot simular aquest de forma aïllada, i recollir el feix resultant a un fitxer, anomenat Fitxer d'Espai de Fases, *Phase Space File* (PSF), per tal de reutilitzar-lo a diverses simulacions. Aquest mateix cas s'il·lustra a la Figura I.14. A l'esquerra de la figura, es mostra la configuració completa dels elements que romanen fixos del dispositiu, com el filtre aplanador i els col·limadors. En general, les simulacions dels dispositius són costoses, ja que s'ha de realitzar el transport de totes les partícules, primàries i secundàries, generades a través de tota l'estructura, en aquest cas, del capçal del LinAc. Una vegada les partícules abandonen el capçal, es troben amb la regió on es recull el PSF. Com que, a partir d'aquest punt, la simulació depèn del problema concret que es considere, dita regió actua com un detector ideal, detenint el transport de les partícules i guardant les corresponents variables d'estat.

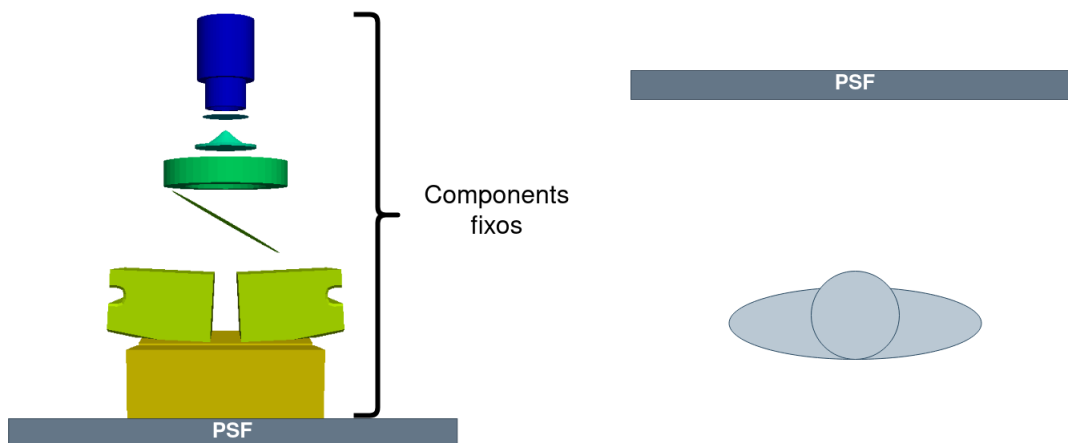


Figura I.14: Esquema d'un LinAc amb configuració de feix de fotons amb una superfície d'espai de fase a l'eixida dels components fixos del dispositiu (esquerra), i una segona configuració amb l'espai de fase generat irradiant un pacient (dreta).

Tota la informació recollida, es guarda en el PSF, el format del qual dependrà del codi de simulació, així com si s'emmagatzema en binari o en text pla. Tot i que cada codi, a més

d'emprar un format propi, emmagatzema diferent tipus d'informació, en tots ells apareixen, com a mínim, les variables fonamentals per a determinar l'estat d'una partícula. Aquestes variables són: el tipus de partícula, energia, pes estadístic, posició i direcció. Depenent del cas, també s'emmagatzema informació del tipus d'interacció que ha generat la partícula, la història a la qual pertany, temps de vol, o identificador de la superfície en que s'ha creat, entre altres.

Els diferents formats, contenen, bé únicament la informació referent a les partícules o, també una capçalera amb informació de la configuració amb la qual es va realitzar la simulació que va generar el PSF.

Una vegada creat el PSF, el codi de simulació emprat permetrà inicialitzar una simulació independent, prenent el fitxer com a font de partícules. És a dir, es continuarà el transport de les partícules emmagatzemades, però, ara dins de la geometria que s'haja definit per al problema específic a tractar. Aquest pas es mostra a la part dreta de la Figura I.14, on el feix emmagatzemat provinent del LinAc, s'utilitza per irradiar un pacient i s'evita la primera part de la simulació.

No obstant, tot i que aquesta estratègia pot estalviar gran part del temps de simulació, s'ha de tenir en compte que, generalment, els PSFs tenen una mida elevada, de l'ordre de GB, i s'ha d'estudiar en quins casos beneficia el seu ús. Açò es deu a l'elevat nombre d'històries necessàries per aconseguir una baixa incertesa estadística, tal i com s'ha discutit a la Secció I.3.2.3.

Tot i que la majoria de codis de MC tenen implementada l'opció de generar i llegir PSF, cadascun utilitza el seu propi format específic, limitant la compatibilitat i reproductibilitat de resultats entre diferents codis. Amb l'objectiu de solucionar aquest problema, l'Agència Internacional d'Energia Atòmica, *International Atomic Energy Agency* (IAEA), ha definit un format de PSF estàndard que pot ser llegit i escrit mitjançant les seves llibreries, les quals s'ofereixen de forma lliure. A més, utilitzant aquest format, la IAEA ha creat una base de dades pública [80] de fitxers d'espai de fase, provinents de diferents LinAcs utilitzats típicament en radioteràpia externa, compilant dades existents que han estat prèviament validades. Més encara, els propis fabricats d'acceleradors empen habitualment aquest format per proporcionar els PSFs.

I.3.4.4 Paral·lelització de les simulacions.

Fins al moment, les tècniques que s'han vist per reduir el temps de simulació, consisteixen en disminuir el cost computacional, ja siga relaxant els paràmetres de configuració, guardant resultats parcials de les simulacions a PSFs, o accelerar la reducció de la variància de la mesura d'interès introduint pesos adients en cada cas. No obstant, en aquesta secció es descriurà un altre tipus d'optimització, consistent en maximitzar l'eficiència dels recursos de maquinari disponibles.

Com s'ha discutit a la Secció I.3.2.3, la mesura resultant obtinguda amb una simulació de MC és, en si mateixa, una variable aleatòria, el valor esperat de la qual coincideix amb el de la magnitud que es pretén obtindre (Equació I.32). Per tant, les execucions es poden subdividir en simulacions més curtes, amb menys històries, per tal d'executar-les de forma concurrent i sumar els resultats al finalitzar. És a dir, una simulació amb N històries totals, es pot dividir en n simulacions independents de N/n històries cadascuna. D'aquesta forma, es poden aprofitar les arquitectures modernes dels processadors, les quals disposen de múltiples cors de processament, i també infraestructures distribuïdes formades per un

conjunt d'ordinadors, com un *cluster*. És a dir, es relativament senzill utilitzar computació paral·lela, per dur a terme les simulacions i millorar així el rendiment.

No obstant, s'ha de tindre cura per a que cada simulació genere una successió de nombres aleatoris independent de la resta, ja que, pel contrari, existirà una correlació entre els resultats de les simulacions. A més, donat que es requereix guardar les mesures individuals de les històries per afegir la seua contribució una vegada finalitzen, com s'ha vist a la Secció I.3.2.3, cada sub-simulació haurà de guardar comptadors propis per poder fer una estimació correcta de les incerteses. Degut a l'increment en l'ús de memòria, aquesta restricció pot arribar a limitar el nombre de simulacions concurrents a executar, depenent del problema a simular i de la memòria disponible a les màquines.

A l'hora de paral·lelitzar el codi per utilitzar tot el maquinari disponible, existeixen diferents aproximacions. D'una banda, si les execucions no requereixen compartir informació, la forma més senzilla consisteix en, simplement, llançar diferents processos del mateix programa, el nombre dels quals dependrà de les característiques de la màquina, com el nombre de CPUs o la capacitat de memòria. L'avantatge d'aquest mètode, és que no es requereix un esforç extra per part del desenvolupador a l'hora d'adaptar el codi.

No obstant, si cal compartir informació entre els processos, una altra opció és emprar l'estàndard *Message Passing Interface* (MPI), el qual permet llançar processos d'un mateix programa, tant a un mateix ordinador com a ordinadors independents interconnectats, i mantindre comunicació entre tots ells, permetent l'intercanvi d'informació. La contrapartida del MPI, és que el codi ha d'adaptar-se per emprar l'estàndard. Tant al primer cas com amb MPI, els processos que es llancen tenen, en general, assignat un espai de memòria independent de la resta. Açò significa que cada procés ha de mantindre una còpia en memòria de tot el requerit per a la simulació, com geometria, materials, etc., encara que aquests siguen constants i comuns per a tots. Aquesta característica, implica que la complexitat d'adaptar un codi de simulació a MPI és relativament baixa. Però, com a contrapartida, l'ús de memòria pot ser un fort limitant en la quantitat de processos concurrents que es poden llançar, podent arribar a deixar el processador infrautilitzat.

Per mitigar els problemes de memòria, es pot adoptar un paral·lelisme *multifil*. En aquest, es generen múltiples fils a partir d'un mateix procés, l'execució dels quals avançarà de forma concurrent i empraran les diferents CPUs del processador. Al ser fils d'un mateix procés, tots ells comparteixen l'espai de memòria comú del procés principal, pel que tots els fils poden accedir a una mateixa còpia de les dades de la simulació, com la geometria. Més encara, amb una planificació adient, es poden millorar els accessos a memòria a nivell de memòria cau, incrementant l'eficiència de l'execució. Malauradament, el fet de compartir accés de memòria també dificulta l'adaptació del codi a aquest tipus de paral·lelisme, on descuits en la implementació poden donar lloc a problemes com condicions de carrera o *false sharing* [81, 82, 83], que ocasionen resultats erronis o, inclús, alentir l'execució del programa. A més, aquest tipus de paral·lelisme, no permet executar fils en màquines independents, però es pot combinar amb MPI per tal d'aconseguir el millor d'ambdós mètodes.

I.3.5 Codis de Monte Carlo aplicats a simulacions en física mèdica.

Existeixen diferents codis de simulació que s'han emprat en càlculs relacionats en física mèdica. Tot i que molts d'ells són de propòsit general, cadascun presenta característiques específiques que els distingeixen de la resta, facilitant o millorant els resultats en problemes específics. Aquestes diferències, es deuen, entre altres, a que cada codi implementa diferents models de física, i la interacció entre aquests, utilitza diferents bases de dades per a la creació

de materials, implementen mètodes propis per definir les geometries, i també el procediment per mesurar les magnituds físiques d'interès. Tot açò, provoca que apareguen diferències sistemàtiques entre codis, que s'hauran de considerar a l'hora d'escollir el codi a emprar. Més encara, per tenir en compte aquestes discrepàncies, una pràctica habitual consisteix en repetir una mateixa simulació, realitzada per grups independents, amb diferents codis de simulació, de forma que el resultat final es considere un consens entre tots ells. Per exemple, aquesta pràctica s'utilitza en els resultats publicats per els *TG* de l'*Associació Americana de Física Mèdica, American Association of Physicists in Medicine (AAPM)*, com el publicat en [84] on es dissenya mitjançant simulació MC una font hipotètica genèrica d'elevada taxa de dosi amb aplicador blindat.

Entre els codis de simulació de propòsit general més emprats, es troben el EGSnrc (*Electron Gamma Shower*) [85, 86], FLUKA (*FLUktuierendeKAskade*) [87], GEANT4 (*GeometryANd Tracking*), PENELOPE (*PENetration and EnergyLOss of Positrons and Electrons*) [74, 88] o MCNP (*Monte Carlo N-Particle*) [89]. A partir d'aquests, s'han creat codis derivats amb eines especialitzades, per facilitar el seu ús o focalitzar-se en un problema específic. Per exemple, GATE [90] es basa en el GEANT4 i s'especialitza en simulacions en imatge mèdica i radioteràpia. Per aconseguir-ho, han implementat suport per a simulacions de PET, SPECT, TC i configuracions per a radioteràpia, entre altres característiques. Estes, permeten simular dispositius mèdics de forma transparent a l'usuari, simplificant així la complexitat d'aquest tipus de simulacions. Un altre exemple és penEasy [91], el qual ofereix una interfície simplificada per a emprar la llibreria PENELOPE. A més, estén la funcionalitat de PENELOPE, per exemple, incorporant la capacitat de simular sobre geometries híbrides definides amb voxelitzats i superfícies quàdriques, o simular la resposta d'un detector. Un altre objectiu dels codis derivats pot ser l'optimització per millorar els temps de còmput, ja que, com s'ha discutit a la Secció I.3.2, aquestes requereixen, en general, un gran cost computacional. Un exemple a destacar és el codi penRed [92], el qual es basa en la llibreria PENELOPE i incorpora totes les seues capacitats. A més d'haver reestructurat, optimitzat i para l'elitzat el codi a dos nivells, tant multifil com MPI, penRed amplia les capacitats de PENELOPE, especialment per a l'àmbit de la física mèdica. Per exemple, incorpora suport per a simular automàticament en imatges mèdiques en format DICOM, incorpora mòduls específics per a realitzar simulacions de tractaments en braquiteràpia [93], de dispositius TC, etc. Cal remarcar, que l'autora ha participat en el seu desenvolupament i validació des dels inicis del projecte, i que actualment continua participant activament en el seu desenvolupament, com es discutirà a la Secció II.

En els treballs presentats en aquesta tesi, s'han emprat diferents codis MC, i són MCNP6, penEasy i penRed, depenent del problema a dur a terme. Les característiques principals dels codis esmenats es descriuran a continuació.

I.3.5.1 MCNP: *Monte Carlo N-Particle*.

MCNP, és un codi de transport de diverses partícules en la matèria, com fotons, neutrons, protons i electrons entre altres. És un codi de propòsit general, que permet l'estimació de magnituds dosimètriques com la fluència, energia dipositada, o dosi, entre altres. El codi va néixer a Los Alamos National Laboratory (LANL) a partir de la conjunció de diferents codis als anys 60, fins que al 1977 va veure la llum la primera versió. Des d'aleshores, el codi ha evolucionat constant i significativament fins a la versió 6.3 publicada recentment.

Pel que fa a la física, el codi implementa tant la dispersió coherent i incoherent per a

fotons, així com l'emissió fluorescent produïda per absorció fotoelèctrica, l'absorció en la producció de parells amb emissió local de radiació d'aniquilació, i la radiació de frenada o *bremsstrahlung* [94, 95, 96, 97]. El rang d'energia dels neutrons és de 0.001 eV fins a 100 MeV, d'1 KeV a 1 GeV per a electrons i d'1 eV a 100 GeV per a fotons. Aquests rangs energètics es donen emprant les llibreries de seccions eficaces per defecte, però aquestes es podem modificar segons les necessitats del problema.

La simulació es configura mitjançant un fitxer de text proporcionat per l'usuari, que el codi llegirà i processarà. Els aspectes més rellevants de l'estructura del fitxer d'entrada es descriuran a continuació, tot i que, informació detallada del mateix, es pot trobar en els diferents manuals de MCNP6 [75, 98, 99].

- **Especificació de la geometria:** la descripció de la geometria en MCNP, pot fer-se de dues formes, bé amb la definició de superfícies que tanquen els volums (cel·les) a definir, o bé emprant geometries mallades generades amb programes externs al codi.
 - Definició de cel·les: aquesta configuració consisteix en construir volums tridimensionals arbitraris, definits per l'usuari, anomenats cel·les, que estan limitades per superfícies matemàtiques. Les cel·les es defineixen mitjançant interseccions, unions i complements de les regions limitades per les superfícies. D'altra part, la definició d'aquestes superfícies, es realitza escrivint en el fitxer d'entrada, els corresponents coeficients de les equacions analítiques, o en certs tipus de superfícies, punts coneguts de les mateixes. A més, MCNP6 ofereix la possibilitat de crear 'macrocosos' ('*macrobodies*'), en els quals es poden combinar formes bàsiques com esferes, caixes o cilindres, amb operadors booleans per crear estructures més complexes.
 - Geometries mallades: des de la versió 6.1 del codi, existeix la possibilitat de realitzar les simulacions amb geometries mallades que empen tetraedres com a elements volumètrics, en compte de o en combinació amb geometries definides per superfícies. Un exemple d'aquest tipus de geometries es mostra en la Figura I.15. En I.15a, es representa el volum del cor complet mallat, mentre que en I.15b, s'ha fet un tall a la geometria per mostrar la seua part interna, i com aquesta està emplenada amb tetraedres. MCNP6, ha abordat la implementació de geometries mallades, permetent la incorporació d'una representació de Malla No Estructurada, *Unstructured Mesh* (UM). Aquesta, està continguda en un univers de MCNP6 que no pot intersectar amb cap altra cel·la, ni cap altre univers o cel·la pot estar contingut en aquesta UM. Originalment, la UM va ser dissenyada per funcionar amb una malla generada amb el programa Abaqus/CAE [79], encara que actualment també funciona amb altres programes, sempre que exporten el fitxer en el format adient. Cadascuna de les parts de la geometria creada amb Abaqus, s'interpreta com una cel·la per MCNP6. Aquesta extensió de les capacitats de MCNP6, permet modelar geometries més complexes i detallades com ja s'ha descrit a la Secció I.3.3.
- **Descripció dels materials i selecció de llibreries de seccions eficaces:** a cadascuna de les cel·les descrites a la geometria, se li assigna, tant una composició isotòpica del material, com les taules de seccions eficaces que s'utilitzaran en la simulació. Aquesta designació, es realitza donant la informació corresponent al número d'identificació



(a) Volum mallat amb contorns dels tetraedres.

(b) Tall del volum mallat.

Figura I.15: Geometria corresponent al cor del maniquí antropomòrfic de la ICRP145 [78] (Secció I.4.2.1). Es representa la geometria mallada completa i un tall per poder mostrar que l'interior del volum està compost pels tetraedres que l'emplenen.

del nucleid, amb l'identificador de l'avaluació de la secció eficaç, i la seua fracció, ja siga en pes o fracció atòmica.

- **Característiques de la font:** existeixen diferents opcions de definir les fonts en MCNP6. Les dues emprades en els treballs d'aquesta tesi, són: font puntual emetent en una certa direcció, o fonts que llegeixen la informació de les partícules des d'un PSF generat prèviament. Aquesta últim cas ja ha estat definit en la secció I.3.4.3, pel que només descriurem breument les fonts puntuals. En aquest cas, s'ha d'especificar al fitxer d'entrada la informació rellevant per mostrejar les partícules: posició de la font x, y, z , energia de les partícules, que pot ser monoenergètica o un espectre, on cada interval d'energia té associada la seua probabilitat d'emissió, i tipus de partícula que s'emetrà. A més, s'ha de determinar la direcció inicial de vol de les partícules de la font. La direcció, es mostreja respecte d'un vector de referència especificat per l'usuari, donant els angles polar i azimutal corresponents. Si aquests angles no s'especifiquen, la distribució serà isotròpica.
- **Tipus de registre o *tally*:** els registres de comptatge s'utilitzen per especificar quines són les magnituds que es desitgen calcular mitjançant la simulació. Les mesures, poden obtenir-se en un punt concret, una superfície, o en un volum tridimensional, depenent de les necessitats del problema. A un mateix problema, es poden especificar diferents registres per obtenir informació de diferents magnituds o a diferents regions. MCNP6 proporciona set tipus diferents de registres estàndards, tots ells mostren els resultats normalitzats per partícula inicial. A continuació, es descriuran els registres emprats a les diferents simulacions que s'han dut a terme en els treballs presentats a aquesta tesi.
 - ***Tally F4*:** mesura la mitjana del flux d'un cert tipus de partícula indicada per l'usuari, en una cel·la. Les unitats són partícules per unitat d'àrea travessada ($partcules/cm^2$) tot i que si al fitxer d'entrada es col·loca un * davant de l'identificador del *tally*, (*F4), mesura el flux energètic en unitats de MeV/cm^2 .
 - ***Tally F6*:** mesura el KERMA de col·lisió, sobre una cel·la. Les seues unitats són MeV/g . Per obtenir aquest valor, es compta la longitud recorreguda per cada

partícula. En cas d'especificar aquest registre com +F6, aleshores es comptabilitza l'energia dipositada de totes les partícules presents en el problema. Com que es mesura la deposició d'energia dins d'una cel·la, la normalització es fa per unitat de volum i, com que la densitat del material és coneguda pel codi per a les cel·les seleccionades, el resultat es mostra normalitzat per unitat de massa.

- **Tally *F8:** mesura l'energia mitjana dipositada en una cel·la deguda a un tipus de partícula especificada per l'usuari. Les unitats s'expressen en MeV .
 - **Tally FMESH:** permet a l'usuari definir una malla rectangular de comptatge superposada a la geometria del problema. Per defecte, el comptatge de malla, calcula l'estimació mitjana del flux de les partícules a través de la longitud de trajecte recorregut en la cel·la. Les unitats són aleshores $partícules/cm^2$. Si un * precedeix la targeta FMESH, es comptabilitzarà l'energia de la partícula en unitats de MeV/cm^2 .
 - **Tally TMESH TYPE 3:** aquest registre també es del tipus superposat a la geometria del problema, que permet obtindre els valors de certes quantitats en una graella rectangular, cilíndrica o esfèrica. En concret, el tipus 3 registra dades de deposició d'energia dipositada per unitat de volum de totes les partícules. Com que la malla definida per al registre és independent del problema, un element de la graella pot cobrir regions de materials diferents i, per tant, de masses diferents. Per eixe motiu, la normalització es fa per unitat de volum i les unitats s'expressen en MeV/cm^3 .
- **Tècnica de reducció de variància:** s'han d'especificar en el fitxer d'entrada, segons quina tècnica es vulga emprar i en quines regions del problema. En les simulacions realitzades per a desenvolupar els treballs d'aquesta tesi, s'han emprat l'*splitting* i *ruleta russa*, explicats a la secció I.3.4.2. En MCNP6, aquests paràmetres s'especifiquen mitjançant la importància de la cel·la. A cada cel·la se li assigna un valor IMP per a cada tipus de partícula, de tal forma que si la partícula viatja entre cel·les amb importància creixent, cadascuna es dividirà en un nombre k de partícules, dividint el seu pes pel valor corresponent. Pel contrari, si la partícula viatja en direcció oposada, aquesta tindrà una certa probabilitat de desaparèixer segons el factor entre les importàncies de les cel·les corresponents. La tècnica de la divisió, s'empra també en el cas en que la font és un PSF. Si en aquest tipus de simulacions, s'especifica un nombre d'històries major a les que es van especificar en el moment de generar el PSF, cadascuna de les partícules serà multiplicada, aplicant el pes corresponent a cadascuna de les partícules filles generades.
 - **Paràmetres relacionats amb la física del problema i condicions de la simulació:** en aquest punt, entraria especificar de quines partícules, primàries i secundàries es desitja fer el seguiment, és a dir, definir el mode de simulació en terminologia de MCNP6. Per a tots els treballs presentats a aquest document, s'ha escollit mode **P E**, és a dir, es farà el seguiment de tots els fotons i electrons. A més, es poden especificar també diferents opcions de la física segons les partícules que es simulen. Per exemple, en el cas dels fotons, es pot especificar si es considerarà la dispersió coherent o no, si es considerarà la producció de reaccions fotonuclears, o si es generen fotons de *bremssstrahlung*, entre altres opcions. S'especificarà també si es desitja modificar les energies de tall respecte els valors per defecte.

I.3.5.2 PENELOPE: *Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons.*

PENELOPE, és un codi de propòsit general escrit en el llenguatge de programació FORTRAN, que permet realitzar simulacions del transport de fotons, electrons i positrons en geometries complexes i materials de composició arbitrària. La física del transport implementada en PENELOPE inclou, per a partícules carregades: la dispersió elàstica i col·lisions inelàstiques tant d'electrons com positrons, la ionització de capes internes per impacte d'electrons i positrons, l'emissió de bremsstrahlung i aniquilació de positrons [100, 101]. Pel que fa a la interacció dels fotons implementa dispersió coherent (Rayleigh) [102] i incoherent (Compton) [103], efecte fotoelèctric [104, 105] i producció de parells electró-positró [106, 107, 108]. El rang d'energies de les partícules simulades és des de 50 eV a 1 GeV.

A més, proveeix diferents models de fonts de radiació, i permet calcular magnituds d'interès com la distribució de dosi o la fluència, entre altres. Cal assenyalar que PENELOPE es distribueix de forma lliure a la *Nuclear Energy Agency Data Bank* ⁶ i a Amèrica del Nord pel *Radiation Safety Information Computational Center* del laboratori *Oak Ridge National Laboratory* ⁷.

Per configurar la simulació, l'usuari ha de proporcionar al programa principal, un fitxer d'entrada que continga tota la informació necessària per executar el problema sota les condicions desitjades i en el format especificat. La informació més rellevant es descriurà a continuació, i per a més detall es pot consultar el propi manual de PENELOPE.

- **Especificació de la geometria:** s'ofereixen dos possibles models de geometria: geometries quàdriques, emprant la llibreria *pengeom*, i voxelitzades. Com que en aquesta tesi s'ha treballat únicament amb el primer tipus, serà el que es descriurà a continuació.

En les geometries quàdriques, la unitat bàsica per definir la geometria són superfícies matemàtiques, com s'ha explicat a la Secció I.3.3, ja siguin predefinides, com esferes, cons, cilindres, etc., o definides per l'usuari a partir dels coeficients de la superfície. Al seu torn, les superfícies es combinen per crear cossos tancats a partir de la intersecció entre aquestes, permetent crear geometries complexes. Una vegada definits, els cossos s'ordenen amb un arbre jeràrquic per a que la rutina identifiqui quin cos es sobreescriu en cada moment, ja que aquests poden estar continguts uns dins d'altres, total o parcialment. Aquesta jerarquia es defineix junt a la definició de cada cos. Un exemple el vegem a la Figura I.16, on es presenta una llavor de braquiteràpia genèrica, amb el seu corresponent encapsulament.

Tota la informació necessària per descriure la geometria, es guarda a un fitxer de text independent al fitxer de configuració de la simulació, respectant el format de la llibreria *pengeom*. La ubicació d'aquest, haurà d'especificar-se al fitxer de configuració de la simulació, i es llegirà quan s'execute per tal de conformar la geometria del sistema.

- **Descripció dels materials i selecció de llibreries de seccions eficaces:** per tal de conèixer quins paràmetres físics s'han d'aplicar al transport de les partícules en cada regió de l'espai, a cada cos definit al fitxer de geometria, se li assigna un material. Al seu torn, la configuració dels materials requerirà d'un fitxer de text, amb el format de materials de PENELOPE, que contindrà tota la informació física necessària d'aquest, com densitat, energies d'excitació atòmica, etc. Els fitxers de materials, es generen

⁶<https://www.oecd-nea.org/databank>

⁷<https://rsicc.ornl.gov>

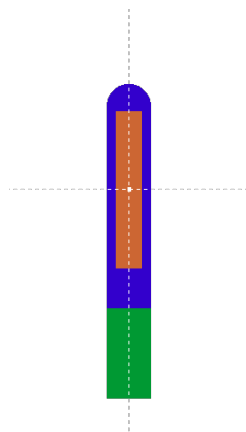


Figura I.16: Exemple de geometria quàdrica corresponent a una llavor de braquiteràpia amb el seu corresponent encapsulament.

a partir de les bases de dades distribuïdes en el paquet de PENELOPE, les quals permeten la creació de materials arbitraris especificant simplement la seua composició i densitat.

- **Característiques de la font:** referent als models de font, PENELOPE permet, tant definir una font genèrica en una regió de l'espai amb diferents mètodes per a mostrejar les variables d'estat de les partícules, com emprar PSF. A més, es poden aplicar filtres per a que les partícules mostrejades s'accepten únicament si es generen en el material especificat. Referent a l'energia de la font genèrica, es pot definir com monoenergètica, especificant simplement el valor d'energia corresponent, en eV, o definir un espectre seguint el format establert per PENELOPE, especificant sempre el tipus de partícula a generar, així com quantes es van a simular. No obstant, existeix una alternativa a especificar manualment l'espectre energètic d'emissió de les partícules i el seu tipus, i és emprant la rutina *PENNUC* [109, 110]. Aquesta, permet mostrejar cascades de decaïment d'un radionúclid específic de forma automàtica. No obstant, cal descarregar la informació del decaïment del radionúclid de la base de dades del *Laboratoire National Henri Becquerel*⁸ en format *pennuc*, i proporcionar-la com un fitxer extern per a la simulació.
- **Tipus de registre o tally:** PENELOPE inclou diferents tipus de registres per tal d'obtenir les magnituds d'interès com a resultat de la simulació, segons les especificacions del problema que es desitja simular. Els resultats dels diferents registres s'expressen normalitzats per història. Per als treballs presentats en aquesta tesi, únicament s'han registrat distribucions espacials de dosi mitjançant una malla voxelitzada tridimensional, superposada a la geometria. La malla, es defineix especificant la seua grandària i el nombre d'elements de volum en les tres dimensions. A l'hora de comptabilitzar els valors de dosi, el codi assumeix que els bins són homogenis, de tal forma que determina la seua massa i densitat segons el valor de material que troba a l'interior del bin. Les unitats dels resultats són eV/g . Aquest registre permet també proporcionar resultats per a distribucions espacials de dues o d'una única dimensió, assignant els valors adients als nombres de bins que es desitgen en les diferents coordenades.
- **Tècnica de reducció de variància:** PENELOPE inclou, entre altres, també les tèc-

⁸<http://www.lnhb.fr/en/>

niques d'*splitting* i *ruleta russa* que ja s'han explicat anteriorment. En les simulacions dels treballs presentats s'ha emprat l'*splitting* en el cas de les fonts de PSF amb la intenció d'augmentar l'eficiència de la simulació.

- **Paràmetres relacionats amb la física del problema i condicions de la simulació:** en aquesta secció cal especificar els paràmetres que definiran la simulació. Els més rellevants es descriuran a continuació. D'una part, les energies de tall, que s'han d'especificar per a cada partícula o material. D'altra part, estan els paràmetres corresponents al transport de partícules carregades, que utilitzen un esquema de dispersió múltiple, conegut com Classe II. De forma simplificada, aquest tipus d'esquemes agrupen les interaccions que ocasionen canvis en l'estat de la partícula per baix d'un cert llindar, conegudes com a *febles*. Estes són modelitzades con una única interacció fictícia, reduint així significativament el temps de còmput. D'altra banda, les interaccions per sobre del llindar, o *fortes*, es simulen explícitament. Tot i que la majoria de codis implementen algun tipus d'esquema de dispersió múltiple, el de PENELOPE destaca per la seua precisió, i, a més, permet establir els paràmetres que defineixen els esmenats llindars:

- W_{cc} : llindar d'energia perduda per determinar les col·lisions inelàstiques.
- W_{cr} : llindar d'energia perduda, en eV, per a emissions dures de radiació de *bremstrahlung*.
- C_1 : desviació angular màxima.
- C_2 : fracció màxima de pèrdua d'energia.

I.3.5.2.1 penEasy

PenEasy ofereix un programa principal modular per a la llibreria PENELOPE. Així doncs, a través d'esta, permet realitzar simulacions del transport de les mateixes partícules (fotons, electrons i positrons), emprant la mateixa física. A més d'incloure la funcionalitat de PENELOPE, simplifica la configuració de les simulacions i incorpora noves característiques, com nous *tallies*, fonts de partícules o la capacitat de combinar geometries quàdriques i voxelitzades, entre altres. Igual que PENELOPE, penEasy és un software lliure i gratuït que es pot descarregar directament de la seua pàgina web⁹. Des de la seua publicació a l'any 2003, el programa ha evolucionat afegint les funcionalitats esmenades a més de la capacitat de llegir i escriure espais de fase en format de la IAEA.

Per configurar la simulació, l'usuari ha de proporcionar al programa principal un fitxer d'entrada que continga tota la informació necessària per executar el problema sota les condicions desitjades i en el format especificat. Tota la informació detallada de la construcció d'aquest fitxer d'entrada es pot consultar el propi manual de penEasy¹⁰.

I.3.5.3 penRed: Parallel Engine for Radiation Energy Deposition.

El codi penRed [92], en el que l'autora ha participat i participa en el seu desenvolupament, es basa en la llibreria PENELOPE, i inclou totes les seues característiques i funcionalitats, ja descrites a la Secció I.3.5.2. No obstant, al contrari que penEasy, penRed no fa un ús directe

⁹<http://www.upc.edu/inte/downloads>

¹⁰<https://inte.upc.edu/en/downloads/peneasy/usermanual.pdf/view>

de les llibreries de PENELOPE, sinó que per al seu desenvolupament, s'ha realitzat un treball de traducció i reestructuració completa del codi per tal de millorar les seues característiques. El flux de treball seguit per a desenvolupar penRed, es mostra en la Figura I.17 i s'explica en detall a continuació. En primer lloc, el codi complet de la llibreria PENELOPE, es va traduir del llenguatge FORTRAN al C++, incloent tota la física, paquets de geometria, la rutina *PENNUC*, i altres funcionalitats de PENELOPE. A continuació, el codi es va reestructurar, en un esquema modular, emprant programació orientada a objectes, permetent la inclusió de nous mòduls de forma senzilla, tant per als desenvolupadors com per als usuaris. Esta estructura, permet estendre la funcionalitat de penRed per a dur a terme problemes específics. Per aconseguir-ho, es proporciona una sèrie de regles que assegurin la compatibilitat automàtica entre mòduls, tant els existents com aquells que s'incorporen en un futur. Més encara, els nous mòduls poden utilitzar tot el paral·lelisme existent a penRed sense un esforç addicional per part del desenvolupador. Tot el detall es troba tant en el manual d'usuari de penRed com en la guia d'implementació, disponible en el propi paquet del codi¹¹.

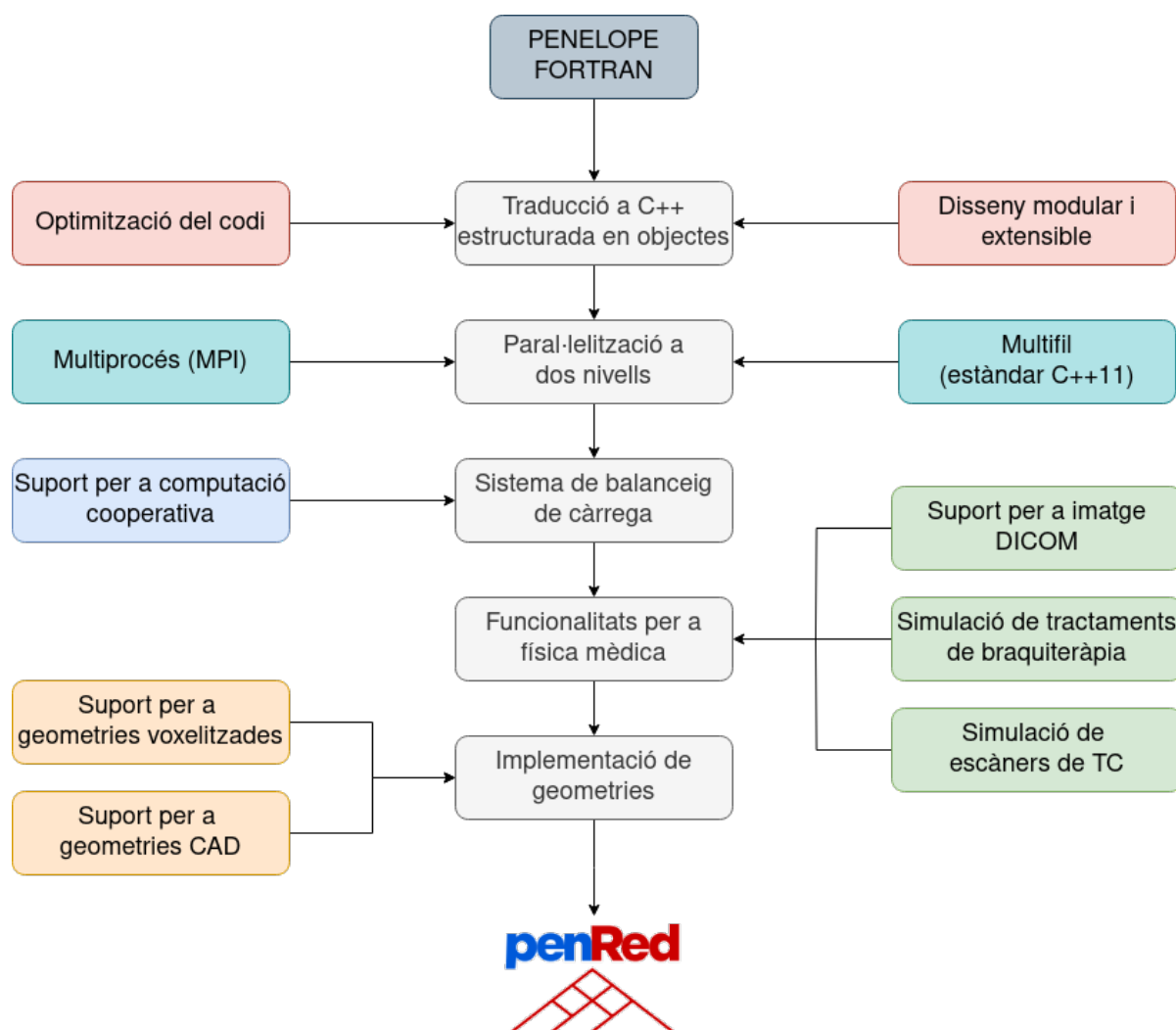


Figura I.17: Flux de treball en el desenvolupament de penRed, des del seu inici fins a la versió actual.

¹¹<https://github.com/PenRed/PenRed>

A més de proporcionar una gran flexibilitat al codi, un altre punt clau en el seu desenvolupament va ser l'optimització d'aquest. En primer lloc, es van reestructurar i organitzar les variables, i el propi codi, per millorar, entre altres, els accessos a memòria. Tot seguit es va paralelitzar el codi per tal de maximitzar el rendiment en les màquines on s'executa la simulació. Aquesta paralelització es va realitzar a dos nivells, amb una aproximació multi-fil, la qual aprofita al màxim les simulacions en un únic node, o en memòria compartida, i amb MPI, per tal d'executar les simulacions en *clusters* en memòria distribuïda, com s'ha discutit a la Secció I.3.4.4. A més, ambdós tipus de paralelisme es poden combinar, podent executar múltiples fils en cada node d'un *cluster* MPI. No obstant, en execucions en *clusters* heterogenis, la velocitat de processament en cada node pot variar. És per açò que es va incorporar, també, un sistema de balanceig de càrrega per aprofitar al màxim aquest tipus d'infraestructures. Centrant-se en la funcionalitat, cal remarcar que, a part de la incorporada de la llibreria PENELOPE, penRed implementa noves característiques, especialment focalitzades en l'àmbit de la física mèdica. Entre altres, destaquen la capacitat de simular sobre geometries voxelitzades i imatge DICOM de forma automàtica, mitjançant la llibreria *dcmTk* [111], la implementació d'una font específica per simular tractaments de braquiteràpia [93] a partir de la informació de la planificació en format DICOM, els registres específics per a obtenir distribucions de dosi i *Histogrames de Dosi Volum, Dose Volume Histogram* en DICOMs, i la possibilitat de simular escàners TC, entre altres. Cal assenyalar, que el paquet de penRed també inclou una eina externa per convertir entre formats d'espais de fase, propis del codi, i l'estàndard de la IAEA. Esta funcionalitat s'ha implementat en esta tesi, a partir del treball realitzat en la secció II.1. Com ja s'ha explicat, aquesta eina és d'especial rellevància a l'hora de participar en estudis d'intercomparació de resultats o de poder emprar informació proporcionada per altres grups de recerca o fabricants de dispositius en format estàndard.

D'altra banda, tant PENELOPE com penEasy manquen d'una funcionalitat present als principals codis de simulació, com MCNP6, i és la capacitat de realitzar simulacions sobre geometries mallades o models CAD, com s'ha discutit a la Secció I.3.3. Per aquest motiu, un dels treballs d'aquesta tesi ha estat la implementació, a penRed, de la capacitat de realitzar simulacions sobre superfícies construïdes amb malles triangulars, que es descriurà amb més detall en la Secció II.4.

I.4 Maniquins per a mesures de dosi experimentals i amb simulació Monte Carlo.

En física mèdica, com ja s'ha comentat al llarg del document, s'empren maniquins per mesurar el comportament de la radiació. Aquests, poden ser dispositius físics per realitzar mesures experimentals, o models matemàtics per poder fer simulacions sobre ells amb codis MC. Ambdós tipus es discutiran a continuació.

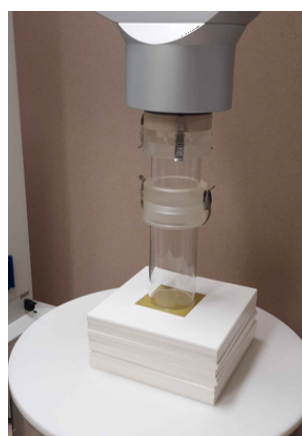
I.4.1 Maniquins experimentals.

Els maniquins o tancs d'aigua, s'empren per a calibrar i verificar la precisió dels equipaments de radioteràpia i de medicina nuclear. S'omplien d'aigua, per tal de simular el teixit humà així com els efectes de dispersió de la radiació dins del cos, garantint així que les dosis de radiació impartides als pacients siguin correctes i segures. Els maniquins en les quals s'han

realitzat mesures per als treballs d'aquesta tesi son la MP1 i MP3 de la marca PTW¹². Un exemple de la MP1 PTW el podem veure a la Figura I.18a. A part d'aquests maniquins, existeixen també els coneguts com maniquins d'aigua sòlida. A diferència dels anteriors, estan fets de materials sòlids que imiten les propietats d'absorció i dispersió de la radiació en el teixit humà. Tot i això, la seua finalitat i propòsit és el mateix, i s'empren d'un tipus o altre dependent de les característiques del muntatge experimental, de la disponibilitat i dels instruments de mesura que s'empren, així com dels objectius de les mesures. El maniquí d'aigua sòlida que s'ha emprat en els treballs de la tesi és el RW3 *Slab Phantom*, també de PTW que es mostra a la Figura I.18b.



(a) Maniquí d'aigua MP1 de PTW.



(b) Maniquí d'aigua sòlid RW3 de PTW.

Figura I.18: Exemples de maniquins d'aigua líquida i sòlida: Maniquí d'aigua MP1 de PTW. Extreta de PTW Products for Medical Physics in Radiation Therapy¹³(a) i Maniquí d'aigua sòlid RW3 de PTW emprat per a mesures en feix de IOERT a l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València (b).

A més dels maniquins d'aigua, existeixen també altres que reproduïxen l'anatomia, parcial o completa, del pacient. Generalment, el seu ús és per estimar mesures de dosi en diferents parts de cos.

I.4.2 Maniquins en simulació MC.

En simulació MC, sovint és necessari fer simulacions sobre maniquins per caracteritzar feixos, càmeres d'ionització o altres dispositius. O per a comparar amb mesures experimentals. Tot i que modelitzar els maniquins d'aigua a partir de superfícies matemàtiques és relativament simple en qualsevol codi MC, no ocorre així si el que es desitja és simular sobre un maniquí antropomòrfic detallat. És per això que, al llarg de la història, s'han desenvolupat diferents maniquins computacionals, millorant les seues característiques anatòmiques i definició dels materials, entre altres, la qual cosa s'ha traduït en poder realitzar simulacions amb mesures de dosi més precises i realistes. Els maniquins antropomòrfics, són eines essencials en la investigació a l'hora de desenvolupar nous protocols i noves tècniques de tractament, així

¹²<https://www.ptwdosimetry.com/en/>

¹³<https://www.ptwdosimetry.com/en/products/rw3-slab-phantom?downloadfile=1816&type=3451&cHash=eee7c204867204d923df30cd74c22616>

com modificacions en els elements i/o materials dels dispositius d'emissió de radiació. A continuació, es descriurà el maniquí més recent proporcionat per la ICRP [78], el qual presenta un elevat nivell de detall.

I.4.2.1 Maniquí computacional mallat de la Comissió Internacional en Protecció Radiològica, *International Commission on Radiological Protection (ICRP) Publicació 145*.

El maniquins computacionals distribuïts per la ICRP en la seua publicació 145 a l'any 2020 [112], són els Maniquís Computacionals de Referència de tipus Malla, *Mesh-type Reference Computational Phantoms* (MRCP), els quals han sigut modelats a partir dels maniquins computacionals adults de referència tipus vòxel de la publicació 110 de la ICRP [113]. Els MRCP es caracteritzen per incloure totes les regions del cos humà que puguen ser definides tant com font o objectiu del tractament, i en les quals es pot estimar la dosis efectiva, incloent regions objectiu d'espessor mil·limètric.

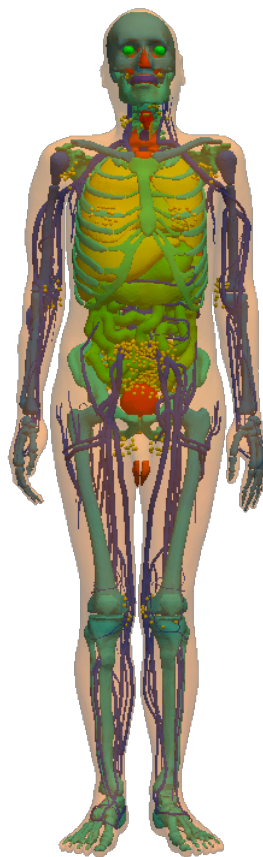


Figura I.19: Elements que conformen el maniquí computacional adult masculí de la ICRP Publicació 145 [78].

Les característiques generals dels maniquins adults, es descriuen a continuació:

- L'altura i pes dels MRCPs s'ajusten als valors de referència, 176 cm i 73 kg per al maniquí masculí i 163 cm i 60 kg per al femení.

- El maniquí masculí està compostat per 2.5 milions de cares triangulars en el format poligonal i 8.2 milions de tetraedres en el format de malla tetraèdrica. En el cas del maniquí femení, aquests valors són 2.6 milions i 8.6 milions respectivament.

Com s'ha descrit a la secció I.3.5.1, el codi MCNP6, té implementada la capacitat de llegir i executar sobre geometries mallades, concretament en aquelles compostades per tetraedres. Com que la ICRP proporciona el maniquí adult masculí i femení directament en format MCNP6, es poden realitzar simulacions amb aquest codi directament, de diferents tipus de tractaments. Açò permet obtindre valors de dosi realistes, i conèixer com es distribueix la dosi en el cos humà, per mitjà de simulació amb major precisió que emprant maniquins d'aigua o els maniquins antropomòrfics voxelitzats.

La contrapartida de les simulacions realitzades amb els MRCPs recau en l'elevat cost de memòria requerit per poder carregar i simular sobre una geometria tan detallada. L'ús de memòria és aproximadament 14 GB en execucions en MCNP6. Pel que fa als temps d'execució, són també majors que en maniquins més simples, però açò es pot compensar emprant versions paral·lelitzades del codi, sempre que es pugui aconseguir el requisit de la memòria.

Capítol II

Recerca científica.

II.1 Eines de conversió entre formats d'espai de fase.

Referència: Sandra Oliver, Belén Juste, Rafael Miró & Gumersindo Verdú: **Toolkit implementation to exchange phase-space files between IAEA and MCNP6 Monte Carlo code format.** *International Journal of Radiation Biology*, 99(3), 373-383 (2023). Taylor & Francis
<https://doi.org/10.1080/09553002.2022.2110296>

Categoria JCR: NUCLEAR SCIENCE AND TECHNOLOGY

Posició: 7/34

Quartil: Q1

Factor d'impacte (2022): 2.6

II.1.1 Introducció i motivació.

L'ús de simulacions de MC en l'àmbit de la física mèdica, ha augmentat considerablement en els darrers anys. Un cas d'ús és el càlcul de la dosi absorbida pels pacients en tractaments de radioteràpia amb LinAcs [25, 114]. Aquest tipus d'estudis, que tenen com a objectiu calcular les distribucions de dosi de manera precisa, requereixen una descripció detallada de la geometria de l'accelerador, així com de les composicions dels seus materials per tal de caracteritzar el feix d'eixida correctament. Aquestes geometries són considerablement complexes, ja que involucren molts components: l'objectiu (emprat per a produir feixos de fotons), el col·limador primari, el filtre aplanador, la càmera d'ionització, els col·limadors secundaris ajustables i el col·limador multilàmines, com s'ha descrit en la Secció I.2.2.1. Aquesta complexitat, fa necessari tindre un coneixement profund pel que fa a la construcció de geometries, ja que, per contra, es poden introduir errors que afecten directament a les característiques del feix d'eixida del capçal del LinAc. Un altre factor que influeix en la caracterització del feix, és la configuració de la font, és a dir, la seua energia, posició i distribució angular.

La simulació del pas de feixos de partícules a través del capçal dels acceleradors, ha sigut objecte d'estudi els darrers anys, per tal de garantir la qualitat i seguretat en les simulacions de MC emprades per a planificació de tractaments de radioteràpia. Nombroses

publicacions han demostrat la precisió d'aquesta tècnica a l'hora de calcular distribucions de dosi [115, 116, 117, 118, 119, 120, 121].

No obstant, tota aquesta informació necessària per a configurar les simulacions, no sempre es troba a l'abast de la comunitat científica, ja que en molts casos, està subjecta a acords de confidencialitat amb les empreses que fabriquen els dispositius mèdics.

A més, el fet d'introduir tots els elements geomètrics i un elevat grau de detall en la simulació, es tradueix en elevats temps de còmput.

Amb la intenció d'estalviar temps de simulació, ja que per a un mateix tractament la configuració geomètrica del LinAc no canvia, existeix la possibilitat d'emprar PSFs, descrits a la Secció I.3.4.3. Aquests fitxers registren la informació necessària del feix, que es recull, típicament a l'eixida del capçal [122].

A més, per tal de salvar els problemes de confidencialitat, en molts casos, els fabricants proporcionen informació del feix a l'eixida del capçal dels acceleradors, just amb un PSF, en compte d'oferir informació de la geometria. Aquest fet, fa palès de la utilitat dels PSF, que permetran tindre informació precisa del feix.

Degut als avantatges que ofereix un format estandarditzat, com el que ha establert la IAEA, molts codis de simulació MC han implementat la compatibilitat de lectura i escriptura dels PSF entre els seues formats propis i l'estàndard. És el cas, per exemple del BEAMnrc/EGSnrc [123], penEasy/PENELOPE [91, 74] i Geant4 [124]. Malauradament, el codi MCNP6 [89], així com penRed [92] no tenien, en el moment de publicació d'aquest treball, una implementació de lectura i escriptura directa en el format de la IAEA. Aquest fet, limita tant la capacitat dels usuaris d'ambdós codis per reproduir els resultats d'altres investigadors. Considerant que la reproductibilitat s'ha convertit recentment en un tema d'interès per a la comunitat científica i institucions arreu del món [125, 126], és interessant abordar aquesta limitació. A més, en el cas específic de la física mèdica, els resultats publicats en protocols internacionals, com ara el TRS-398 [127], són calculats independentment per diversos grups de recerca, que utilitzen diferents codis de MC, per establir un consens de les dades calculades [128]. Per tant, la capacitat de compartir fitxers de PSF entre diferents codis podria millorar la idoneïtat d'aquests, per a estudis compartits.

II.1.2 Objectius de l'estudi.

Amb la intenció d'abordar les limitacions esmentades, l'objectiu d'aquest treball és desenvolupar una eina capaç de realitzar les conversions entre el format estàndard de PSF de la IAEA, i el format propi del PSF del codi MCNP6.

En un pas posterior, es va aprofitar el treball desenvolupat, per implementar també aquesta funcionalitat en el codi penRed, tot i que no apareix a l'article publicat.

II.1.3 Materials i mètodes.

II.1.3.1 Descripció de les eines: IAEA2MCNP i MCP2IAEA.

L'eina desenvolupada, com a objectiu d'aquest treball, es presenta com una llibreria lliure, pendent de publicar en l'Agència d'Energia Nuclear, *Nuclear Energy Agency* (NEA), i escrita en llenguatge C. Esta, és externa al codi de simulació MCNP6, pel que no es requereix una llicència d'aquest.

Concretament, s'han desenvolupat dos programes. El primer, anomenat IAEA2MCNP, capaç de convertir del format IAEA al format MCNP6, i el segon, MCNP2IAEA, que realitza

la conversió inversa. Ambdós programes, han sigut implementats emprant les llibreries internes de lectura i escriptura que ofereix la IAEA.

S'ha de tenir en compte que els convertidors entre formats de PSF s'han implementat per a les últimes versions de MCNP6: MCNP6.1 i el MCNP6.2. Com que els fitxers de PSF es veuen lleugerament afectats entre versions, per a posteriors versions de MCNP, les eines presentades s'haurien d'actualitzar per tal de mantindre la compatibilitat.

II.1.3.2 Descripció dels formats d'espai de fase de la IAEA i MCNP6.

Tot i que la majoria de codis de simulació, emmagatzemen gairebé la mateixa informació en els seus PSF, com ja s'ha discutit, els formats no són els mateixos. En concret, el format estàndard de la IAEA emmagatzema la informació en dos fitxers, mentre que codis com MCNP o PENELOPE, ho fan en únic fitxer. D'una part, la IAEA emmagatzema la capçalera en un fitxer en text pla. Esta conté informació referent a la simulació que ha generat dit espai de fase, per exemple, amb quin codi s'ha generat, si s'han emprat o no tècniques de reducció de variància, la mida del fitxer o el nombre de partícules inicials, entre altres. D'altra part, es troba el fitxer en binari, que conté la informació referent a les partícules emmagatzemades, és a dir, posició i direcció de les partícules, tipus de partícula (fotons, electrons, positrons o neutrons són els tipus actualment acceptats), entre altres. Tota la informació detallada sobre aquests dos fitxers, es troba disponible en la pàgina web del projecte de la IAEA [122, 80].

En el cas de MCNP, l'espai de fase s'escriu en un únic fitxer en binari, el qual conté tant la capçalera amb la informació referent a la simulació que l'ha generat, com, a continuació, el llistat de les variables d'estat de les partícules emmagatzemades. No obstant, no existeix una documentació formal sobre aquest fitxer en binari i, a més, el seu format canvia entre versions. Malgrat açò, per poder desenvolupar aquest treball, s'ha realitzat un estudi exhaustiu d'enginyeria inversa, per tal d'obtindre la informació necessària del format. Per aconseguir-ho, ha sigut necessari desenvolupar un convertidor de binari a ASCII, per poder visualitzar tota la informació inclosa en el PSF. Amb tot açò, es determina que el PSF generat amb MCNP consta d'una capçalera amb 5 seccions o registres:

- Primer registre: conté el nom del codi que ha escrit el PSF, la versió, la data de quan es va crear el fitxer i la data de quan es va executar la simulació. Conté també un identificador i un títol de l'ordre del fitxer d'entrada que ha generat dit espai de fase. Finalment, conté el darrer *dump* en l'execució de la simulació que genera el PSF.
- Segon registre: emmagatzema el nombre d'històries de la simulació que ha generat el PSF. També, conté el nombre de partícules que s'han escrit en el PSF. Tot seguit, es troba el nombre de variables que s'emmagatzemen per a cada partícula escrita, que, en aquest cas, són un total d'onze. Finalment, emmagatzema el nombre de superfícies que s'han considerat com superfícies de fase, així com el nombre d'històries independents en la simulació executada.
- Tercer registre: en aquest, es troba el nombre de cel·les que contenen a l'espai de fase, és a dir, quants elements de la geometria es consideraran com a font en les següents simulacions a partir del PSF generat. Finalment, s'emmagatzema el tipus de partícula de la font inicial.
- Quart registre: conté informació referent a la superfície de fase en la qual s'emmagatzemen les partícules, el seu índex de geometria dins de la simulació, el tipus de superfície

i el nombre de coeficients necessaris per definir-la.

- Registre resum: per a cada superfície que en la simulació s'haja considerat com una superfície de fase, s'emmagatzema informació referent a quants tipus de partícules estaven presents en la simulació, així com quantes partícules s'han emmagatzemat de cadascun d'ells.

Després de la informació de la capçalera, es troba el llistat, amb les variables d'estat de cadascuna de les partícules emmagatzemades, és a dir, el tipus de partícula, pes estadístic, la seua energia, components cartesianes de la posició, direcció respecte dels eixos X , Y , el temps de vol de la partícula, el número d'història al que pertany i el número de superfície en la qual s'ha recollit el PSF.

Comparant ambdós formats, a l'hora de desenvolupar les eines de conversió, s'ha de tenir en compte, a més de les unitats amb les quals treballa cada codi, tres aspectes principals:

- el format de la IAEA proporciona els tres cosinus directors (u, v, w) , respecte a les tres eixos de coordenades (X, Y, Z) , mentre que MCNP6 només emmagatzema (u, v) . Per resoldre aquesta qüestió i, com que la direcció es troba normalitzada a la unitat, és a dir $u^2 + v^2 + w^2 = 1$, el valor de w és pot obtindre fàcilment. Si més però, el signe de w no pot obtindre's a partir de la informació de (u, v) . En MCNP6, aquesta informació ve donada en la variable que emmagatzema el tipus de partícula, de tal forma que, si el tipus de partícula té signe negatiu, es tradueix com que viatja en l'eix $-Z$, i el contrari si el seu signe és positiu.
- com ja s'ha esmentat, per a que MCNP6 interprete correctament la informació del PSF, és necessari que en el llistat que recull la informació de cada partícula, aparega també l'identificador de superfície en la que cadascuna d'elles ha sigut emmagatzemada. El format IAEA, no proporciona aquest valor, per tant, l'usuari l'haurà d'especificar a l'hora d'executar l'eina IAEA2MCNP.
- el format de MCNP6, emmagatzema també el temps de vol de les partícules llistades, el qual no apareix en el format de la IAEA. En aquest cas, en la conversió emprant IAEA2MCNP, aquest valor s'estableix nul per defecte. Aquesta és una limitació del format de la IAEA.

II.1.3.3 Proves de verificació de les eines desenvolupades: IAEA2MCNP i MCNP2IAEA.

A continuació, es descriuran les proves que s'han dut a terme per a la verificació de les dues eines desenvolupades. Aquestes es divideixen en dos blocs, un primer on es compararan directament els PSF transformats, sense simular, i un segon on s'utilitzaran en simulacions de prova per comprovar que els resultats són compatibles.

Per a la primera prova, s'han utilitzat els fitxers disponibles a la base de dades de la IAEA, les característiques dels quals es recullen a la Taula II.1. Aquests, s'han convertit del format de la IAEA a MCNP6 (versions 1 i 2), i de nou al format IAEA, comprovant que els fitxers inicials i finals, eren equivalents.

En segon lloc, s'han dissenyat una sèrie de proves, amb simulacions, per tal de comprovar que els PSFs transformats es poden carregar i simular correctament. A més, en aquestes proves, s'utilitza un altre codi MC de referència, que ja implemente compatibilitat amb el format de la IAEA. El codi escollit és penEasy. El diagrama de les simulacions i conversions

realitzades per a aquesta prova, es mostra en la Figura II.1. S'executa una simulació inicial en MCNP6, prenent una font cònica de fotons de I-131 col·locada a l'origen i en direcció $+y$, de tal forma que es produiran partícules en direcció positiva i negativa tant en l'eix Z com en l'eix X . A 10 cm de la font, es recull un espai de fase, en el propi format de MCNP6, PSF_1 . En aquest punt, la prova es divideix per donar lloc a dues simulacions amb la mateixa configuració, però, fent les conversions adients per poder emprar també el codi penEasy/PENELOPE. Continuant amb l'esquema, d'una part, es realitza una segona simulació amb MCNP6, emprant com a font directament l'espai de fase PSF_1 . D'altra part es converteix el PSF_1 a format IAEA, emprant l'eina MCNP2IAEA. Posteriorment, s'executa, amb penEasy, una simulació emprant el PSF convertit. En ambdues simulacions descrites, es recull, a 20 cm de l'origen un nou espai de fase, PSF_2 , en format MCNP6 en el primer cas, i en el format IAEA en el segon. Tot seguit, es converteix el PSF_2 obtingut amb MCNP6 al format IAEA fent ús de MCNP2IAEA. Finalment, els dos PSF_2 generats amb la mateixa configuració de les simulacions, però amb codis diferents i amb les conversions esmenades, es converteixen a format ASCII amb l'eina 'iaea2ascii' proporcionada per la IAEA, per poder comparar-los.

Cal assenyalar que, per tal d'aïllar el problema a la conversió entre formats, s'ha simulat un univers i superfícies d'espai de fase amb material buit, de tal forma que les diferències en la implementació de la física entre formats no afecten als resultats.

Taula II.1: Característiques principals de l'espai de fase de la IAEA emprat en la primera verificació, per comprovar la correcta conversió entre formats IAEA-MCNP6-IAEA

Nom del feix	Tipus de màquina	Mida del camp
6 MV PHOTON BEAM	VARIAN CLINAC 600C	10×10 (cm ²)
Partícules	Energia de tall (KeV)	Nombre
Photons	20	55755586
Electrons	100	101764
Positrons	100	3478
Total		55860828

II.1.3.4 Tests complets d'un exemple complex.

Una vegada s'han verificat, amb exemples simples, les eines desenvolupades, es prepara un exemple complex. Aquest, consisteix en realitzar una simulació d'un feix d'un LinAc, dirigit a un maniquí d'aigua de $40 \times 40 \times 40$ cm³. Es realitzen un conjunt de simulacions per comprovar el correcte funcionament d'ambdues eines. Aquestes es descriuen breument a continuació:

- **Prova IAEA2MCNP:** es parteix d'un PSF corresponent a un feix de fotons de 6 MeV d'un Varian Clinac 600 C, extret de la base de dades de la IAEA [129, 130]. Amb l'eina IAEA2MCNP, es converteix aquest PSF a format MCNP6, i s'executa una simulació, recollint al maniquí d'aigua la PDD i els perfils de dosi a diferents profunditats, mitjançant un registre 'TMESH Type 3'. En aquesta simulació, i seguint

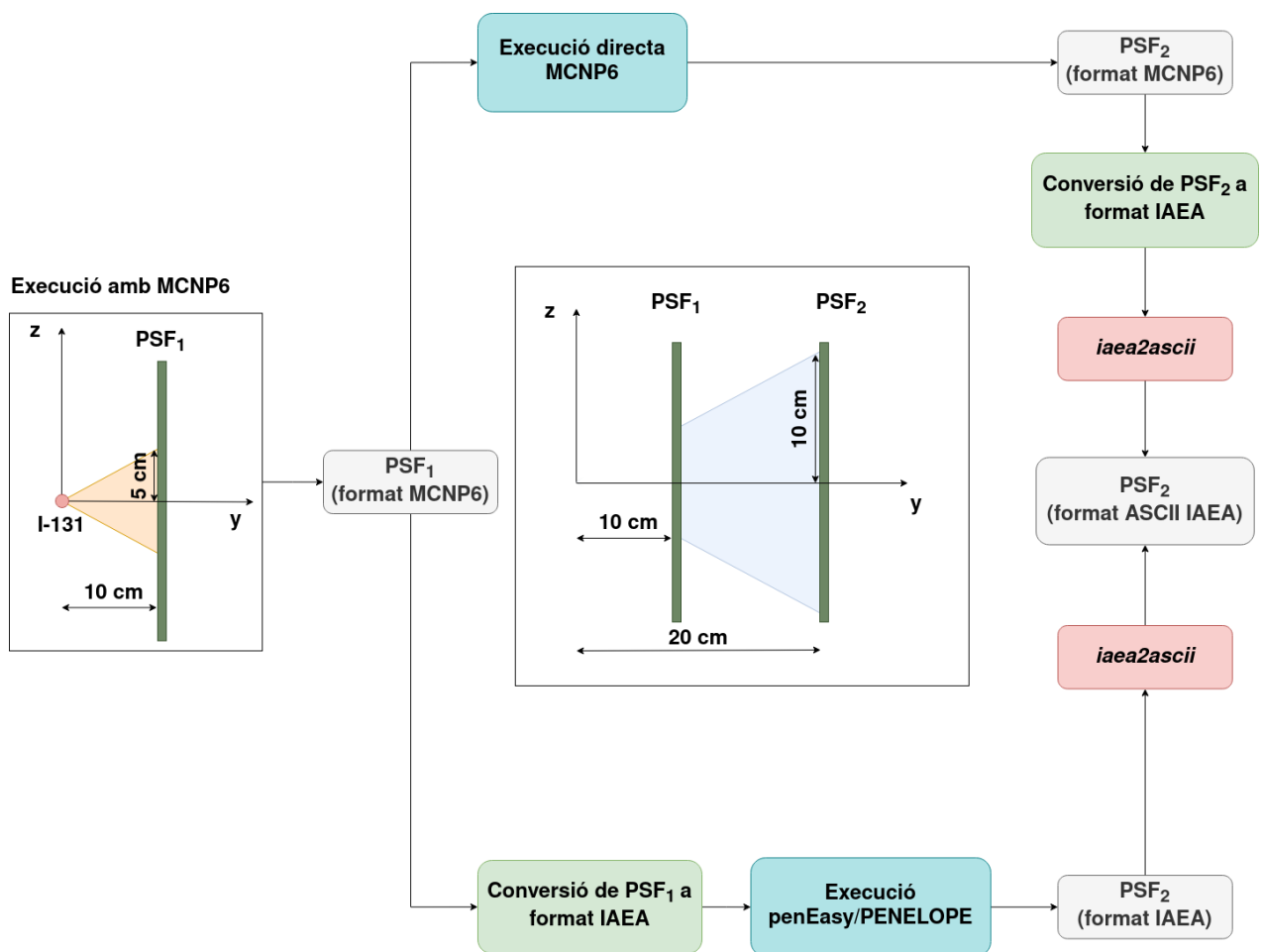


Figura II.1: Esquema de la prova de verificació emprant el codi MCNP6 i el codi penEasy/PENELOPE, amb una font cònica inicial del I-131 i dues superfícies per emmagatzemar l'espai de fases.

la informació de la capçalera del PSF emprat, s'ha col·locat el maniquí d'aigua tal que la Distància Font Superfície, *Source Surface Distance* (SSD) és de 90 cm. D'altra part, es realitza una simulació equivalent amb penEasy, directament amb el PSF de la base de dades de la IAEA. Ambdues simulacions reproduïen les mateixes condicions (SSD, dimensions del maniquí, etc.) i recollint les mateixes corbes a les mateixes posicions amb el registre 'Spatial Dose Distribution'.

- **Prova MCNP2IAEA:** en aquesta prova, s'empra la geometria completa d'un Varian Clinac 2100 C, ja implementat en el format de geometria que és capaç de llegir MCNP6, gràcies als plànols proporcionats per Varian sota acords de confidencialitat i prèviament validat [131]. La geometria s'ha configurat per a generar un camp de 10×10 cm², i una SSD de 100 cm, amb el feix dirigit en l'eix z positiu. Amb aquesta disposició, s'executa una simulació inicial en MCNP6, recollint un PSF a l'eixida de l'accelerador. El PSF resultant s'empra per a una segona simulació, d'una part amb MCNP6 directament i, d'altra part, convertint el PSF a format IAEA i executant la simulació amb penEasy. De la mateixa manera que en la prova anterior, es recull la PDD i els perfils de dosi a diferents profunditats del maniquí.

La Taula II.2, mostra de forma resumida, les característiques principals de les simulacions descrites a aquesta secció.

II.1.4 Resultats.

A partir de les primeres simulacions descrites, s'han comparat les distribucions espacials de les partícules registrades, mostrant que, en ambdós casos, es genera el camp circular de radi 20 cm. A més, s'han calculat les diferències relatives vòxel a vòxel, mostrant que en el 99% dels vòxels, aquesta diferència és zero, i que per a l'altre 1% dels vòxels, les diferències es troben entre $\pm 0.5\%$, les quals s'han analitzat i s'atribueixen a diferències en l'arrodoniment entre els codis.

En el cas del primer exemple complex, partint del PSF de la base de dades de la IAEA, s'han representat conjuntament les corbes de dosi en profunditat i els perfils obtinguts. Aquestes corbes de dosi s'han representat amb les corresponents barres d'error a 2σ , mostrant resultats entre codis estadísticament compatibles. Per mostrar que, efectivament les distribucions són compatibles, s'han representat els quocients de les PDDs obtingudes, junt amb les desviacions estàndard del quocient. Aquests resultats han mostrat en tots els casos, estar uniformement distribuïts al voltant de la unitat. A més, s'han calculat els residus entre les distribucions, és a dir, s'han histogramat les distàncies, en desviacions estàndard, punt per punt entre ambdós codis, mostrant que el 97.5% de les diferències, es troben a una distància dins de les 2σ , i el 100% es troben per sota de 3σ . En el cas dels perfils a diferents profunditats, s'han realitzat les mateixes comprovacions, mostrant en tots els casos que el 96% de les diferències es troben a 2σ , i el 100% per sota de 3σ . Tot açò, verifica la compatibilitat entre les simulacions realitzades, així com el correcte funcionament de les eines de conversió entre formats desenvolupades. Finalment, per comparar les distribucions completes i no només un conjunt 1D de corbes de dosi, s'ha realitzat una avaluació 3D γ [135] amb una tolerància $1\%/1mm$ entre les distribucions obtingudes amb MCNP6 i penEasy. L'anàlisi mostra un 98.3% dels vòxels amb γ inferior a 0.05, i el 100% per sota de 0.23.

Taula II.2: Resum de les principals característiques de les simulacions Monte Carlo realitzades en aquest treball.

Ítem	Descripció	Referències
Codi	MCNP6.1, MCNP6.2 penEasy (v20190921)	[89, 98, 99] [74, 91]
Validació	Execució PSF en IAEA format, prèviament validat per a penEasy	[132, 133, 129]
Execució	IAEA PSF 55860828 partícules AMD Opteron(TM) Processor 6272: MCNP6.1 115 hores de CPU, MCNP6.2 108 hores de CPU, penEasy 112 hores de CPU. Generació de PSF amb MCNP6.2 AMD Opteron(TM) Processor 6344: 560 hores de CPU i 1×10^9 històries. MCNP PSF 15890453 partícules AMD Opteron(TM) Processor 6344: MCNP6.2 145 hores de CPU, penEasy 152 hores de CPU.	[134]
Descripció de la font	PSF original IAEA a l'eixida d'un Varian Clinac 600C. Feix de fotons de 6 MV. Mida del camp $10 \times 10 \text{ cm}^2$, SSD = 90 cm. PSF a l'eixida d'un Varian Clinac 2100C. Feix de fotons de 6 MeV. Mida del camp $10 \times 10 \text{ cm}^2$, SSD = 100 cm.	[133]
Seccions eficaces	MCNP: MCPLIB84, EL03 penEasy: Fotoelèctric des de PHOTACS Compton des de l'aproximació de l'impuls relativista. Dispersió de Rayleigh emprant la teoria de pertorbació no relativista Relaxació atòmica amb les transicions de probabilitat EADL	[94, 95, 96, 97] [104, 105] [103] [102] [106, 107, 108]
Paràmetres del transport	$E_{tall}^e = 200 \text{ KeV}$, $E_{tall}^f = 10 \text{ KeV}$ en tots els materials. Per a penEasy, $C1=0.1$, $C2=0.1$, $WCC=100 \text{ KeV}$, $WCR=10 \text{ KeV}$ i $DSMAX=1e30$.	
Tècniques de reducció de variància	Divisió de partícules en les fonts de PSF.	[75, 98, 99], [74, 91]
Quantitats registrades	Dosi absorbida en el maniquí d'aigua.	
Incertesa estadística	$\leq 3\%$ ($k=2$)	
Post-processat	Cap	

En el cas del segon exemple complet, partint del PSF generat amb MCNP6, s'han realitzar les mateixes comparacions. Tant els resultats dels residus, com l'avaluació 3D γ , mostren el mateix comportament que en el cas anterior, conduint a la mateixa conclusió: s'ha verificat el correcte funcionament dels convertidors entre formats de PSF.

II.1.5 Article.

A continuació s'adjunta la versió d'autor de l'article original d'aquest treball, on es troben tots els detalls i bibliografia corresponent.

Toolkit implementation to exchange phase-space files between IAEA and MCNP6 Monte Carlo code format

S. Oliver^a, B. Juste^a, R. Miró^{a*} and G. Verdú^a

*corresponding author: rmiro@upv.es

^a*Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM), Universitat Politècnica de València, València, Spain*

Purpose: Some Monte Carlo simulation codes can read and write phase space files in IAEA format, which are used to characterize accelerators, brachytherapy seeds and other radiation sources. Moreover, as the format has been standardized, these files can be used with different simulation codes. However, MCNP6 has not still implemented this capability, which complicate the studies involving this kind of sources and the reproducibility of results among independent researchers. Therefore, the purpose of this work is to develop a tool to perform conversions between IAEA and MCNP6 phase space files formats, to be used for Monte Carlo simulations. **Materials and Methods:** This paper presents a toolkit written in C language that uses the IAEA libraries to convert phase space files between IAEA and MCNP6 format and vice versa. To test the functionality of the provided tool, a set of verification tests has been carried out. In addition, a linear accelerator treatment has been simulated with the PENELOPE library using the PenEasy framework, which is already capable to read and write IAEA phase space files, and MCNP6 using the developed tools. **Results:** Both codes show compatible depth dose curves and profiles in a water tank, demonstrating that the conversion tools work properly. Moreover, the phase space file formats have been converted from IAEA to MCNP6 format and back again to IAEA format, reproducing the very same results. **Conclusion:** The toolkit developed in this work offers MCNP6 scientific community an external and validated program able to convert phase space files in IAEA format to MCNP6 internal format and use them for Monte Carlo applications. Furthermore, the developed tools provide also the reverse conversion, which allow sharing MCNP6 results with users of other Monte Carlo codes. This capability in the MCNP6 ecosystem provides to the scientific community the ability not only to share radiation sources, but also to facilitate the reproducibility among different groups using different codes via the standard format specified by the IAEA.

Keywords: IAEA *phsp* format, phase space file, Monte Carlo simulations, MCNP

Introduction

Monte Carlo (MC) methods for simulation of radiation transport through matter are used in several applications, for example to characterize detectors, to obtain absorbed energy distributions in radiological protection field, dosimetry calculations, in medical physics, several processes in the industry, etc. Indeed, these methods have become increasingly used in medical physics in the last years, especially in radiotherapy treatments. An example of its application in the medical physics field, is the calculus of the absorbed dose distribution in patients undergoing treatments with beams emitted by a Linear Accelerator (LinAc) (Verhaegen et al. 2003, Rogers and Bagheri 2006). This kind of studies require a precise description of the accelerator geometry and material compositions to be able to characterize the outgoing radiation beam. Unfortunately, the simulation of the accelerator itself involves a huge computational time. However, treatments involving the same LinAc configuration use the same beam. Thus, saving the beam

characteristics in a scoring surface, allows the simulation to be performed without repeating the beam simulation through the accelerator geometry, significantly speeding up the entire simulation process. This is done via the phase space (*phsp*) files, which register the necessary information to characterize the state of each particle reaching a scoring region, i.e., saves, at least, the energy, direction, position, statistical weight and particle type. Extra variables could be included also depending on the MC code. For instance, following the LinAc example, the scoring region is commonly located at the exit of the head (IAEA Nuclear Data Section 2006).

Although the capability to create *phsp* files is wide implemented in most MC codes, each one uses their own specific format, which limits compatibility and reproducibility between different codes. Aimed to solve this issue, the International Atomic Energy Agency (IAEA) has defined a standard *phsp* format which can be read and written using its libraries, which are freely offered. Using this format, the IAEA has created a public database (IAEA NAPC, 2020) of *phsp* files from linear accelerators used in external radiotherapy, by compiling existing data that have been properly validated. Also, this format is used by therapy unit manufacturers to provide the *phsp* information of a commercial device when this is required by hospitals or research groups for different purposes as calibrations, or dose estimation in radiotherapy planning. Considering that manufacturers information is usually subjected to strong confidential agreements, this approach greatly simplifies the procedures to be able to carry out studies on this type of device. Furthermore, as has been discussed, it also avoids the repetition of lengthy MC calculations performed already by others research groups and enhances reproducibility among different groups and codes providing a set of common data for several applications.

Due to the advantages that a standardized format offers, many general-purpose MC codes have implemented compatibility with IAEA *phsp* format. For example, it is the case of BEAMnrc/EGSnrc (Kawrakow, 2017), penEasy/PENELOPE (Salvat, 2009, Sempau et al., 2011), and Geant4 (Agostinelli et al., 2003, Cortés-Giraldo et al., 2012). Unfortunately, MCNP6 (Los Alamos Scientific Laboratory, 1979) does not have an implementation of the IAEA format recognition. Therefore, it is not possible to run phase spaces files written in this standard format in MCNP6 simulations, and neither allows to write *phsp* files generated with MCNP6 in this format. This fact limits both, the capability of MCNP6 users to reproduce the results of other researchers, and the reproducibility of MCNP6 results with other codes. Considering that the reproducibility has lately become a topic of interest for researchers and institutions worldwide (European Commission, 2016, Public Library of Science), is interesting to address this MCNP6 limitation. Moreover, in the specific case of medical physics, the results published in international protocols, such as the TRS-398 (IAEA, 2005), are calculated independently by several research groups, who use different MC codes, to establish a consensus of the calculated data (Giménez-Alventosa et al., 2020). Therefore, the capability to share phase space files between different codes could enhance the suitability of MCNP6 to be present in this kind of shared studies.

Aimed to address the mentioned limitations, this work presents the development of a freely distributed open-source library, written in C language, able to read *phsp* files provided in the IAEA format and convert them into the binary format used by the MCNP6, and vice versa. Therefore, it allows to use IAEA *phsp* files for MCNP6 simulations and share MCNP6 calculated *phsp* to be used by IAEA compatible applications and to be submitted to the IAEA database.

Materials and methods

In this section, the components used to develop the presented tools are described. These tools consist of two programs. The first one, is capable to convert from IAEA into MCNP6 *phsp* format and is named IAEA2MCNP. The second one, named MCNP2IAEA, performs the reverse conversion, i.e., from MCNP6 to IAEA format. Both use the IAEA provided library to be able to read and write its *phsp* format. The IAEA files with the routines and the corresponding documentation are available at the web site of the IAEA *phsp* project¹. Take into account that both programs have been implemented for MCNP6.1 and MCNP6.2, which are, currently, the latest versions of MCNP6. As future versions of MCNP could involve changes on the *phsp* header or in its internal format, these tools should be revised and upgraded to ensure compatibility

¹ <http://www-nds.iaea.org/phsp>

with the future versions of MCNP. In the remaining section, both, IAEA and MCNP6 *phsp* formats will be briefly described along with the considerations taken into account to perform the conversions. Then, the performed tests will be described.

Description of IAEA *phsp* format

The IAEA *phsp* consist of two files. The first one is a binary file of extension “.IAEAphsp” (Capote, 2006), which registers the state of all particles that reach the scoring surface i.e., energy (E), in MeV, particle type (represented by a number associated with each of them: photon = 1, electron = 2, positron = 3, etc.), statistical weight ($wght$), the cartesian component of the position (x, y, z) in cm, the direction cosines of the linear momentum (u, v, w), some storage space for integer extra variables, as the incremental history number (n_{sat}) among others. The second file is an ASCII file with extension “.IAEAheader”. This one specifies the format and structure of the data or event generator code, such as the used byte order, the *phsp* size, etc.

An example of the *phsp* file is shown in the Table 1, where the “iaea2ascii” tool provided by the IAEA project has been used to covert the binary *phsp* to ASCII. In this table, PT refers to the particle type, and Ch refers to the charge of the particle.

PT	Ch	x	y	z	u	v	w	E	wght	n_{sat}
1	0	3.348	2.381	66.8	0.050	0.035	0.998	1.711	$6.67e^{-4}$	12
1	0	-2.718	3.081	66.8	-0.040	0.046	0.998	1.711	$6.67e^{-4}$	0
1	0	-1.444	-1.230	66.8	-0.021	-0.018	0.999	0.803	$6.67e^{-4}$	0
2	-1	-4.335	-1.390	66.8	-0.149	0.059	0.986	2.082	$6.67e^{-4}$	0

Table 1. An example of the information in a phase space file in IAEA format (4 particles).

Description of MCNP *phsp* format

MCNP6 code provides the capability to write and read *phsp* files with two input cards. The first card is the Surface Source Write (SSW), which is associated to a geometry surface defined in the input file. It is used to record the state of any particle that crosses the scoring surface. The second card, the Surface Source Read (SSR), is used to read the particle information stored in the surface source file and uses that information as a source in a subsequent MCNP6 simulation. More information of these cards can be found at MCNP User's Manual (Goorley, 2012), (Werner, 2017), (Werner, 2018). Nevertheless, no formal documentation of the MCNP *phsp* binary format exists, and its format has change between MCNP versions. Despite this, the internal format of the *phsp* files of the MCNP code for versions 6.1 and 6.2 has been exhaustively studied in this work, reaching the following conclusions. The *phsp* generated with MCNP6 is written in a single file which includes the header and the list of particle state variables. The header is organized in six sections and contains relevant information as the name and version of the code that wrote the surface source file, the date when the file was written, the number of simulation histories, or the number of tracks recorded in the source surface, among other variables. Fortunately, most of these fields, are only informative to the MCNP code and its values neither are mandatory nor affect the simulation results. Therefore, these information fields can be filled with default values allowing the MCNP6 to work properly. Following the header information, the particles data is found, containing a list of state variables of each particle. These ones are particle type, energy, cartesian components of the position, statistical weight, particle direction cosine with X and Y axis, the time of flight of the particle, the history number and the number of the surface where the *phsp* file was recorded.

Conversion between IAEA and MCNP *phsp* format

Due to the differences between IAEA and MCNP *phsp* formats, some considerations must be taken into account to perform the conversion tools.

Firstly, the IAEA format provides the three direction cosines (u, v, w), but MCNP write only two of them u and v . Nevertheless, as the direction is considered to be normalized to the unit i.e., $u^2+v^2+w^2=1$, the w value is calculated by the MCNP2IAEA tool to be written in the IAEA *phsp* file. However, as the sign of w cannot be determined only with u and v information, in the MCNP format this sign is provided via the particle type. For instance, in MCNP6, the particle type number assigned to photons is “16”. If the Z component of the photon direction is positive, the particle type in the *phsp* is set to “+16” but is assigned to “-16” otherwise. Using this information, the correct sign can be assigned to the calculated w variable. The inverse procedure is used in the conversion from IAEA to MCNP format.

Secondly, in the MCNP *phsp* particle list, the number of the scoring surface is a mandatory variable, which is not provided in the IAEA format. To solve this problem, the user must specify it as an argument in the execution of the IAEA2MCNP tool.

Finally, the time of flight of each particle is written in the MCNP *phsp* format but not by the IAEA. Therefore, the time is set by default to zero when IAEA2MCNP tool is used to convert between formats. Notice that it is a limitation of the IAEA format.

Verification tests

In this section, a set of verification tests have been carried out involving only file format conversions, i.e., with no interaction simulation. The first test of this section will check the conversion using *phsp* files of the IAEA database. Then, a second test has been defined to check the conversion from *phsp* files produced by MCNP6.

In the first test, to check the correct conversion between formats, a set of IAEA *phsp* files have been converted to the MCNP6 format and then, converted back to IAEA format. The *phsp* analysed in this section corresponds to the “Varian_Clinac_600C_6MV_10x10.IAEAheader” and “Varian_Clinac_600C_6MV_10x10.IEAephsp”, both downloaded from the web site of the IAEA *phsp* project². The main characteristics of this *phsp* are summarized in the Table 2.

To evaluate the equivalence between converted files, both *phsp* were analysed, i.e., the original IAEA *phsp* and the produced *phsp* after IAEA to MCNP6 conversion and MCNP6 to IAEA conversion. To perform the comparison the “iaea2ascii” utility provided by the IAEA has been used.

The second test has been designed to check the correct assignation of the sign in the Z direction component. In addition, this test will verify the correct reading and writing of the *phsp* files when the conversion tools has been used on MCNP6 generated *phsp*. Moreover, the test will involve a different MC code to ensure the compatibility of the generated IAEA *phsp*. For this purpose, an MCNP6 simulation has been performed generating a *phsp* file, which conversion to IAEA format has been tested with penEasy. PenEasy has been chosen because it implements the capability to both, simulate and generate directly phase space file in the IAEA format. Therefore, penEasy allows an easy validation of both tools, IAEA2MCNP and MCNP2IAEA.

The set up of this test is shown in Figure 1 and described following. First, a I-131 photon source located at (0, 0, 0), aiming to + Y axis, was simulated with MCNP6 code with $1 \cdot 10^7$ primary particles. This source consists of a cone that produces a circular field of $r_1=5\text{ cm}$ at $y_1=10\text{ cm}$. Notice that this configuration will produce particles in positive and negative directions in both, Z and X axis. Therefore, this case tests the correct assignation of the sign in the Z direction component (w). At y_1 , the *phsp*₁ is used in two simulations. The first one continues the simulation with another MCNP6 run using the *phsp*₁ as source, simulating all the particles scored. For the second case, the *phsp*₁ is converted to IAEA format and then, used as a source of a penEasy simulation. The simulations in both codes are equivalent, i.e., from y_1 to $y_2=20\text{ cm}$, generating a field of $r_2=10\text{ cm}$ at the last surface. Finally, a *phsp*₂ is scored at y_2 with both, the penEasy and MCNP6 simulations. In the first simulation, resulting *phsp*₂ from penEasy run is obtained directly in IAEA format by the penEasy code and then is converted to ASCII using the mentioned “iaea2ascii” tool provided by the IAEA project. In the second simulation, the resulting *phsp*₂ from MCNP6 run is converted to IAEA using MCNP2IAEA tool and then to ASCII with “iaea2ascii”. Finally, both IAEA ASCII *phsp*₂ were compared and analysed.

² <http://www-nds.iaea.org/phsp/photon/>

Beam name	6 MV PHOTON BEAM	
Machine Type	VARIAN CLINAC 600C	
Original Histories	23446736	
Particles	Photons	55755586
	Electrons	101764
	Positrons	3478
Energy Cutoff	Photons	20 KeV
	Electrons/Positrons	100 KeV
Field size	10 x 10 cm ²	

Table 2. Main characteristics of the *phsp* file used in the first verification with the aim to verify the correct conversion between formats.

To isolate the problem of format conversion, an empty universe with void material has been simulated to not affect the particle tracking. Thus, differences in the physics implementation will not affect the final results. The *phsp* quadric surfaces are also assigned to void material. These simulations have been executed in SENUBIO ISIRYM research group's cluster, named Quasar, with a parallelized version of MCNP6 using the MPI standard with 26 processes. The 6.1 version for MCNP6 simulations has been used, and the penEasy version v2020-03-25, for penEasy/PENELOPE simulations.

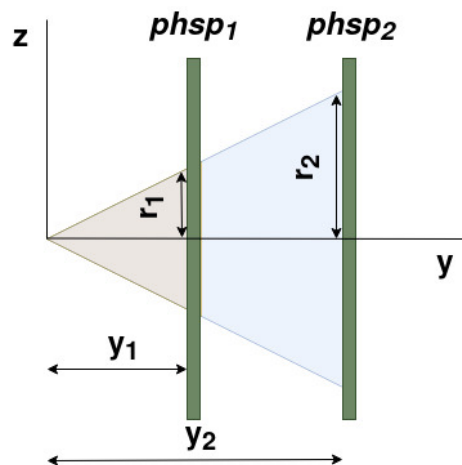


Figure 1. Set up diagram of the MCNP and penEasy/PENELOPE simulations of a conical source with two scoring surfaces defined.

Complete tests

In this section, a complete set of tests with simulations of a LinAc beam directed to a water tank has been performed. To verify both tools, MCNP6.1 and the latest version of penEasy/PENELOPE codes have been used. Following, the simulations performed are described, which have been done with an objective uncertainty of 3%.

IAEA2MCNP test

To test the IAEA2MCNP tool a *phsp* file of a 6 MeV photon beam issued by the medical linear accelerator Varian Clinac 600 C provided by the IAEA database was used. As the header of this *phsp* file indicates, the MC codes used for this LinAc geometry construction and the phase space file generation were PENELOPE 2008, penEasyLinac and penEasy v.2009 (Salvat, 2019), (Sempau et al., 2011).

The geometry model of the Clinac emitting a photon beam includes the tungsten target, primary collimator, flattening filter, ionization chamber, and the adjustable *X* and *Y* jaws photon collimators. In this model, the gantry is vertically oriented (0 degrees). This *phsp*, was created with an electron monodirectional point source, generating a monoenergetic beam of 5.88 MeV, with $2.3 \cdot 10^7$ original histories. The origin of the source is at $z=0$ cm upstream face of the target, and the central position of the target is located at $x=0$ cm, $y=0$ cm. The upper and lower jaws apertures have been configured to provide a field size of 10×10 cm² at a source to surface distance (SSD) equal to 90 cm. Finally, the *z* axis direction is parallel to the beam direction, pointing downstream and the *phsp* scoring plane is located at $z=66.8$ cm from the source.

The IAEA2MCNP tool developed in this work, is used to convert the described *phsp* file from the IAEA format to MCNP6 binary format. A simulation with MCNP6 has been performed using the converted *phsp* as a source with $1.15 \cdot 10^9$ number of particles. This one, simulates the particle transport from the *phsp* source surface, at $z=66.8$ cm, to a liquid water tank of 40 cm size in each axis, centered in $(x,y) = (0,0)$. The surface of the water tank is located at $z=90$ cm, i.e., SSD of 90 cm. To obtain the depth dose and profiles curves along the water tank, the MCNP6 tally named "TMESH Type 3" is used. This tally returns the total energy deposited in each cell of a grid overlaid on top of the problem geometry, normalized by history. In this case, a rectangular mesh is chosen. Each of these cells is a voxel with size of $0.2 \times 0.2 \times 0.2$ cm³. The absorbed energy values are directly converted to dose using the water density (in g/cm³).

To validate the obtained results with the MCNP6 code, the same IAEA *phsp* described before is used as a source in a penEasy/PENELOPE simulation, reproducing identical conditions (SSD, water tank dimensions, number of particles, etc). The dose depth and profiles curves has been obtained, with the same voxel size, using the Spatial Dose Distribution tally, which returns the absorbed dose per history in each voxel.

MCNP2IAEA test

In this case, to validate the MCNP2IAEA capabilities, a detailed simulation of a Varian Clinac 2100 C model, emitting a 6 MeV photon beam is performed. The geometry of the LinAc has been accurately modelled and it is shown in the Figure 2, including all the head accelerator components. This detailed geometry has been created thanks to the blueprints transferred to ISIRYM research group under a confidential agreement with Varian for research purposes. The geometry has been generated using 3D Modeling Software for Engineering ANSYS SpaceClaim, and the solid model has been meshed with Abaqus/CAE (Abaqus, 2014). Meshed geometries present the advantage of a higher accuracy in the geometry modelling. The unstructured grid imported from Abaqus/CAE is used as the input file geometry for the MCNP6 simulation, which enables the use of different cells, allowing the construction of complex geometries and optimizing the number of cells used. The geometry model has been previously validated with experimental results (Morató et al., 2017).

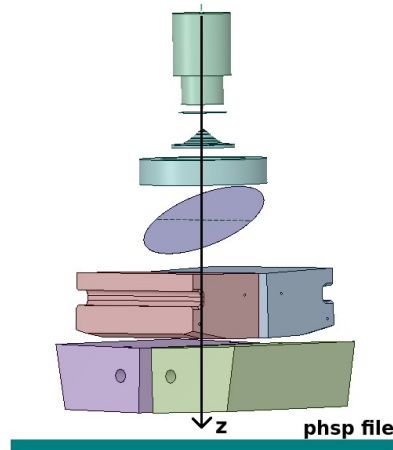


Figure 2. Three-dimensional geometry model of the Varian Clinac 2100 C used for 6 MeV photon beam and 10x10 cm² field size. Geometry modelled using SpaceClaim.

A simulation of the described LinAc configuration has been performed with the corresponding photon spectra obtained from (Sheikh-Bagheri et al., 2002), with the gantry vertically oriented. MCNP6 allows to simulate a wide type of particles depending on the problem. To specify the particle types to be simulated, MCNP6 includes a field named “mode” in the configuration file. Among the available modes, in this case, the “mode P E” has been selected to enable the tracking of photons (P) and electrons (E). The number of particles is set to $1 \cdot 10^9$, achieving standard deviations below 3%. The apertures set for *X* and *Y* jaws generate a field size of 10 x 10 cm² at an SSD of 100 cm. The particle beam has been aligned parallel to the *z* axis, pointing downstream, along the accelerator head. Finally, the particles at the exit of the LinAc are stored in a surface source in a *phsp* file.

The resulting *phsp* file is used as a source for the second simulations step. Therefore, a simulation with the penEasy/PENELOPE code has been performed with the converted MCNP6 *phsp* to IAEA *phsp* format. As performed with IAEA2MCNP tool tests, the simulation consists of particle transport from the source surface to a water liquid tank with 40 cm size in each axis, but, located at an SSD=100 cm. Dose results from depth dose and profiles curves along the water tank are obtained using the Spatial Dose Distribution tally with voxel size of 0.2 x 0.2 x 0.2 cm³. To validate obtained results with penEasy/PENELOPE code, an analogous simulation running directly the *phsp* with MCNP6 code was performed, using the same voxel size for dose results.

Results

In this section, the results of both verification and complete tests described in the previous sections are discussed. Notice that for complete tests, dose curves are presented in units of eV/g per history, where a history refers to a primary particle entering in the LinAc head accelerator and all its secondary particles.

Results for verification tests

For the first verification test, the IAEA *phsp* files, which main characteristics are described in Table 2, have been converted to MCNP format and converted back to IAEA format, and the resulting files are evaluated. Both files produce the very same distribution for each variable of the *phsp*, since the differences between each parameter of the *phsp* file are zero. For the sake of brevity, Figure 3 shows the histograms of energy, *x* and *u* distributions for photons and energy, *y* and *v* for electrons. However, all the *phsp* parameters are compared between original and converted files showing identical results. These comparisons shown that the original file and the converted to MCNP and converted again to IAEA format are identical.

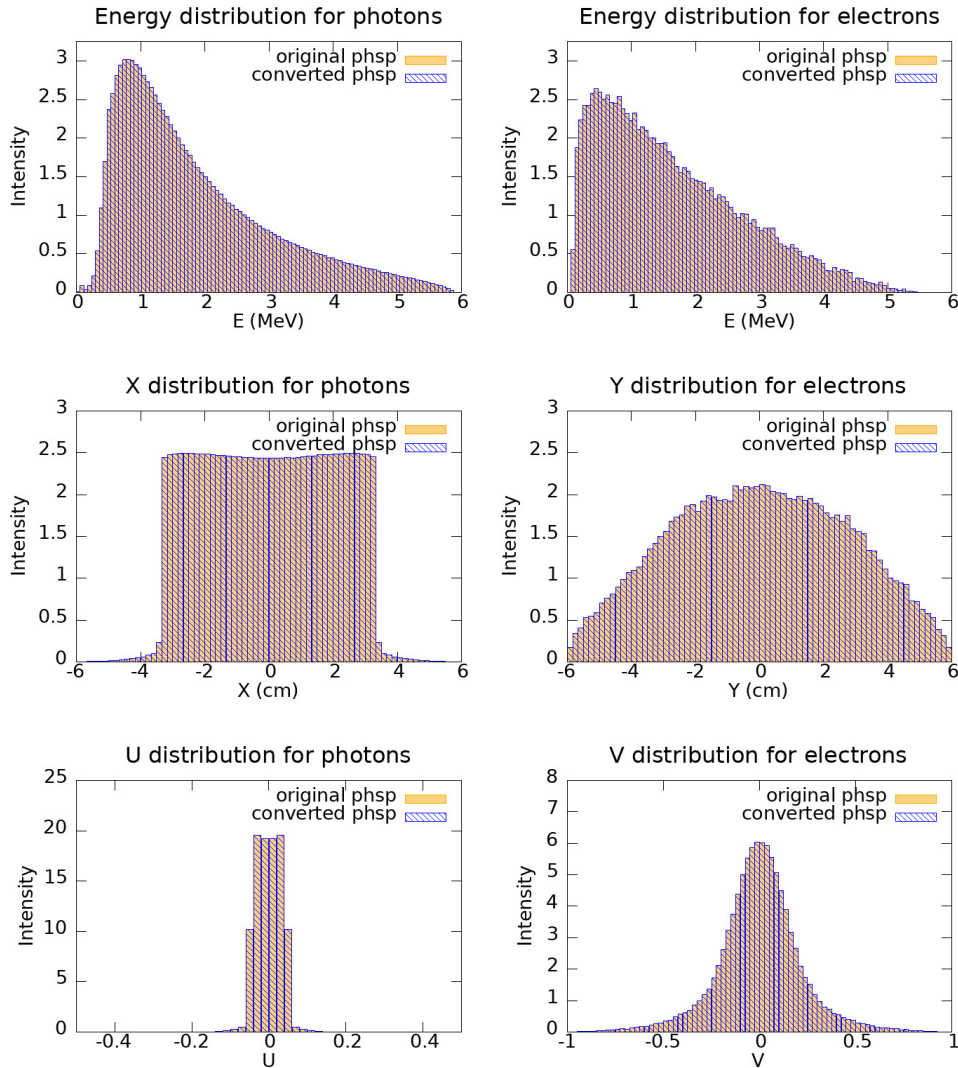


Figure 3. Histogram of *phsp* parameters distributions between the original set of files of IAEA *phsp* downloaded from the IAEA database and the same converted to MCNP and back to the IAEA format. Energy, x and u distributions are shown for photons (left) while energy, y and v distribution are shown for electrons (right).

The second verification test which consists of a simulation of a I-131 photon conical source with two scoring surfaces was also analysed. In this case both IAEA ASCII *phsp₂* obtained with penEasy/PENELOPE and MCNP respectively, were compared.

Figure 4 shows the equivalence between the energy spectrum while Figure 5 shows the comparison between the particle position distribution for penEasy/PENELOPE (left) and MCNP6.1 (middle). In this case the field at y_2 is shown with the corresponding radius (r_2). Finally, Figure 5 right, shows the voxel-to-voxel relative differences between particle distribution of both codes, presented in percentage. As it is shown, both distributions are completely equivalent. In fact, the differences of the 99% of the voxels are zero and the other 1% is within the $\pm 0.5\%$. These minor differences have been attributed to rounding differences between MCNP6 and penEasy codes.

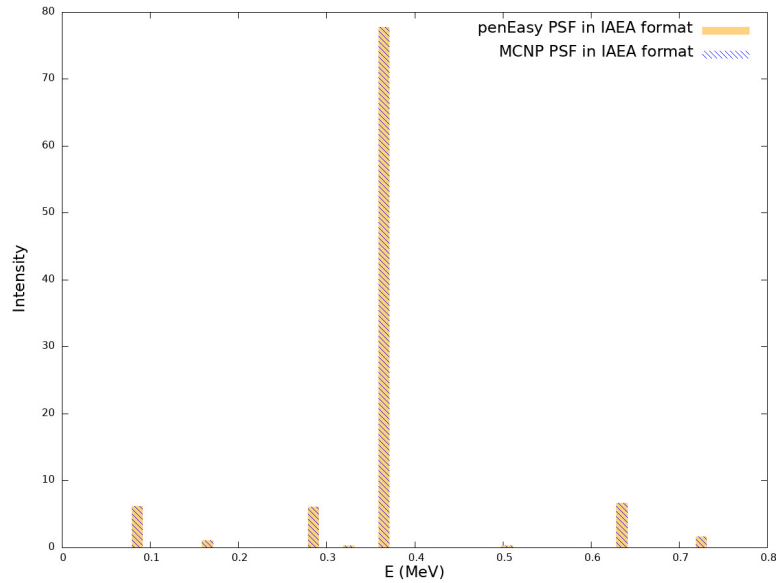


Figure 4. Energy distribution corresponding to both MCNP and penEasy/PENELOPE simulations at *phsp₂* surface.

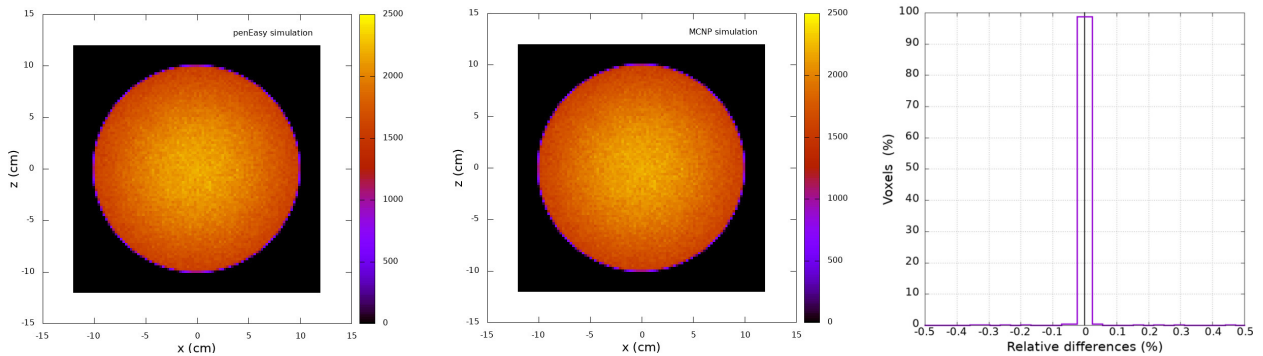


Figure 5. Particle distribution for penEasy/PENELOPE simulation scored at *phsp₂* surface (left), particle distribution for MCNP6.1 run scored at the same surface (middle), and the ratio between distribution of both codes (right).

Results for IAEA2MCNP tool

Figure 6 and Figure 7 show the depth and profile dose distributions, respectively, obtained using the phase space file of Varian Clinac 600 C provided by the IAEA database.

For the sake of clarity, the dose values of these figures are shown using empty symbols for penEasy/PENELOPE and with filled symbols for MCNP6. In both cases, the represented error bars correspond to two standard deviation (2σ). These error values are directly provided by the simulation code. To ensure that distributions simulated with both codes are compatible, a test over each depth point has been done. For instance, Figure 8 left presents the quotient, point by point, of both depth dose distributions showing the relative deviation between them. In this graph, the error bars represent on standard deviation of the quotient. As can be seen, all points are well distributed around the 1, as expected due the statistical uncertainties. Moreover, in the Figure 8 right, the distance in standard deviations, compared again point by point between both codes, has been histogrammed. This one show that the 97.5% of differences are within 2σ and all of them are within 3σ , demonstrating the compatibility between MCNP6 and penEasy/PENELOPE calculated distributions. This analysis has been repeated also for dose profile distributions at different z values showing an equivalent behaviour.

To compare the whole dose distribution and not only a 1D set of profiles and depth dose a 3D gamma evaluation (Low et al., 1998) has been done with 1%/1mm tolerance between MCNP6 and penEasy/PENELOPE distributions. The percentage of voxels with γ less than 0.05 was 98.3% and all of them are below 0.23. It is concluded that no dosimetric differences exist. Moreover, Figure 9 presents the γ values for the YZ plane at $X=0$ cm showing the γ distribution along the water tank depth.

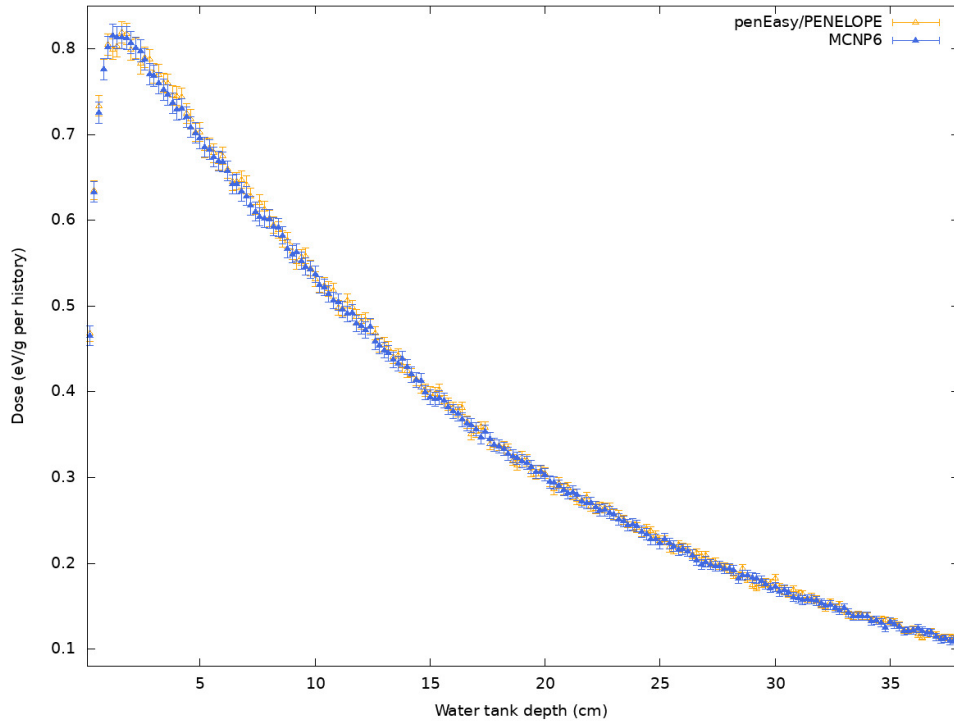


Figure 6. Depth dose curve along the z axis of a water tank at $SSD=90$ cm obtained with penEasy/PENELOPE (empty symbols and error bars of 2σ) and MCNP6 (filled symbols and error bars of 2σ) after phase space file conversion using IAEA2MCNP tool.

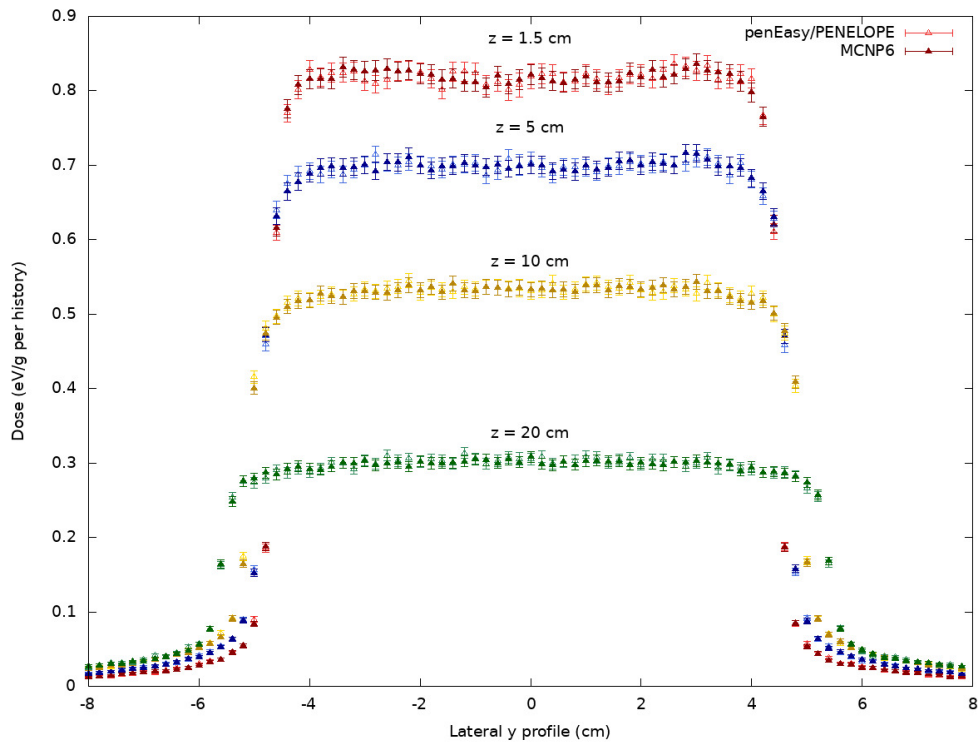


Figure 7. Lateral profiles along y axis at different water tank depths, obtained with penEasy/PENELOPE (empty symbols and error bars of 2σ) and MCNP6 (filled symbols and error bars of 2σ) after phase space file conversion using IAEA2MCNP tool.

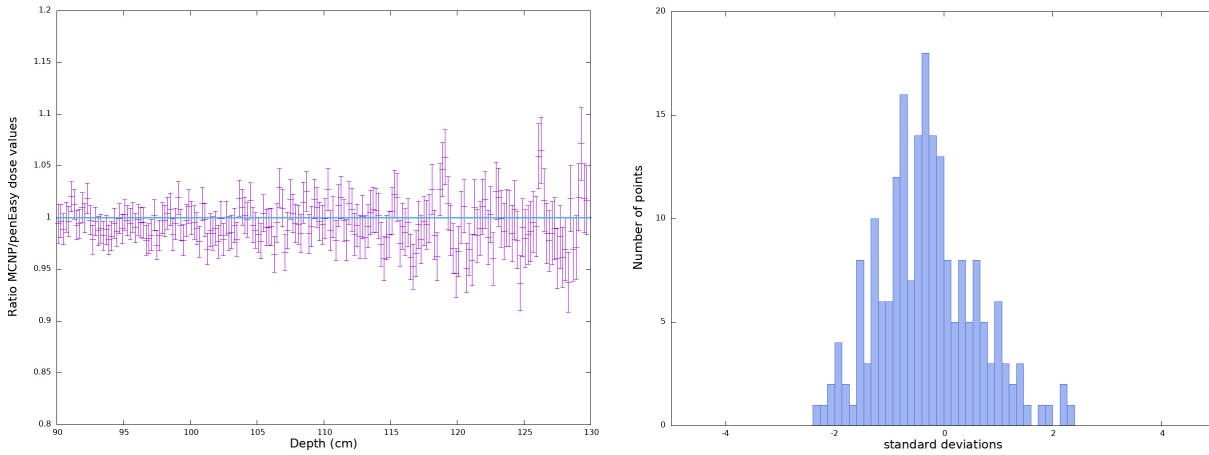


Figure 8. Ratio between penEasy and MCNP6 dose values of the depth dose distribution (left), and residual values from the penEasy and MCNP6 depth dose curves (right).

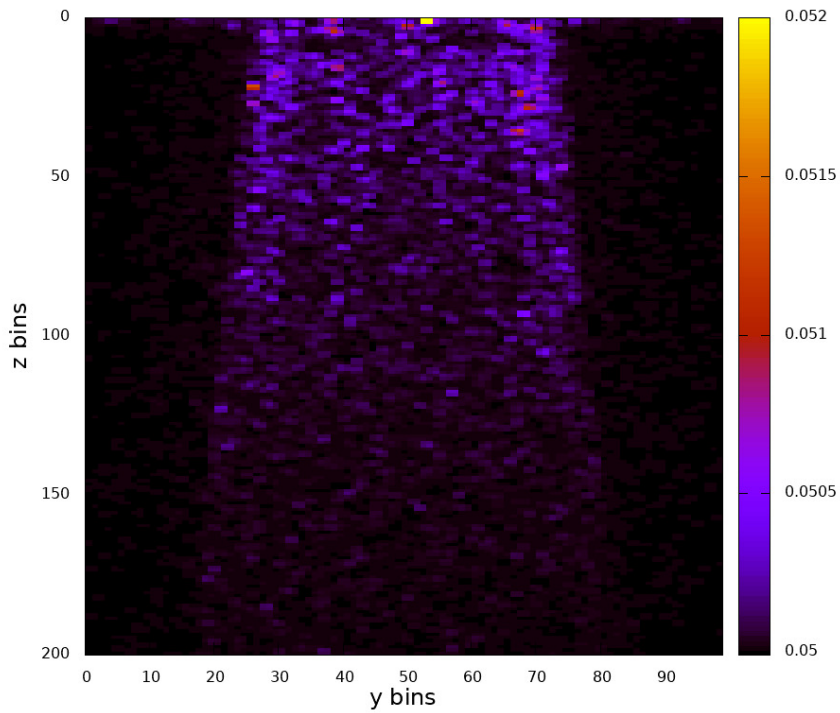


Figure 9. Gamma values for the YZ plane at X=0 cm showing the γ distribution along the water tank depth.

Results for MCNP2IAEA tool

The results obtained for depth and profiles dose curves using the phase space file generated with MCNP6 of a Varian Clinac 2100 C geometry, are shown in Figure 10 and Figure 11 respectively. To be consistent with the results of the previous section, in these figures, empty symbols are used for penEasy/PENELOPE dose values and filled symbols for MCNP6. The 2σ for these values has been calculated, showing the corresponding error bars at Figures 10 and 11. Moreover, a study of the residuals and 3D γ evaluation, as done in the previous test, shows the same behavior between MCNP6 and penEasy/PENELOPE distributions as the performed in the Figure 8 and Figure 9 respectively. Therefore, this study will not be discussed again in the current test.

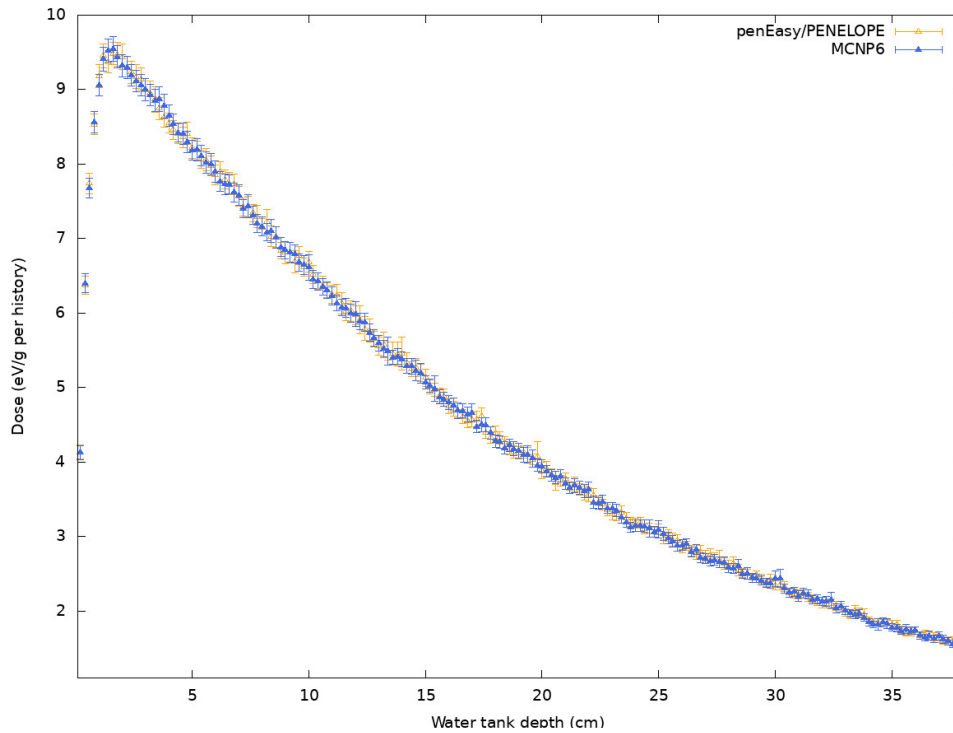


Figure 10. Depth dose curve along the z axis of a water tank at $SSD=100$ cm obtained with penEasy/PENELOPE (empty symbols and error bars of 2σ) and MCNP6 (filled symbols and error bars of 2σ) after phase space file conversion using MCNP2IAEA tool.

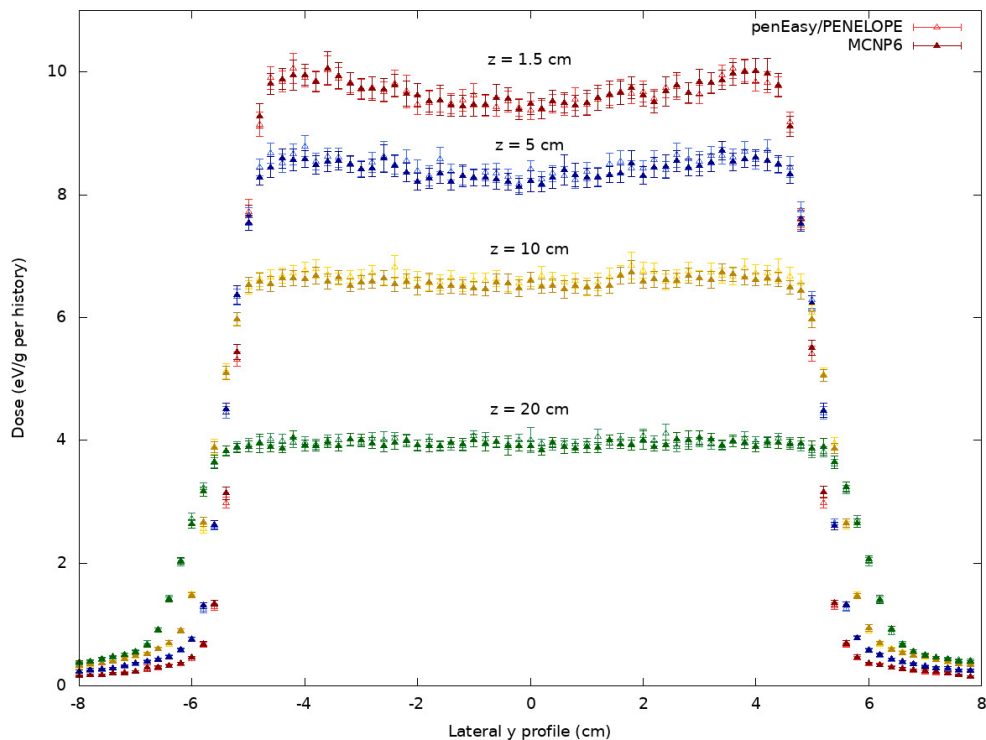


Figure 11. Lateral profiles along y axis at different water tank depths, obtained with penEasy/PENELOPE (empty symbols and error bars of 2σ) and MCNP6 (filled symbols, with error bars of 2σ) after phase space file conversion using MCNP2IAEA tool.

Conclusions

MCNP6 Monte Carlo code has still not implemented the capability to read and write phase space files using the IAEA format. Therefore MCNP6 users cannot use *phsp* files from IAEA database or other files in this format. The lack of this capability in the MCNP6 code, makes difficult to compare results with other research groups, limiting the reproducibility capabilities of MCNP6 and its suitability to be used on comparative studies. Moreover, as most manufacturers provide their spectra using the IAEA format, to avoid sharing details on the hardware geometry and materials due to confidential agreements, MCNP6 was not capable to perform studies with this kind of sources. Nevertheless, the tool developed in this work solves these problems, offering to the MCNP6 scientific community an external program able to read *phsp* files in IAEA format and write it in the internal binary MCNP6 format. Furthermore, the developed tools provide also the reverse conversion, write in IAEA format a *phsp* file generated with an MCNP6 run. Both tools have been validated in this work showing a perfect agreement between original and converted *phsp* files in all cases. Although the verifications have been done against radiotherapy applications with linear accelerators, both tools are application independent, and can be used with no restriction on any IAEA or MCNP6 *phsp* file. Also, a complete simulation has been compared against the penEasy/PENELOPE code, which already implements the capability to use the IAEA *phsp*, showing, once again, a perfect agreement.

In addition, the provided tools require no user knowledge about the MCNP6 nor IAEA *phsp* format, being easy to use. Furthermore, they only require the file names as input parameters. Additionally, the MCNP2IAEA tool will allow to increment the IAEA data base with *phsp* generated with MCNP6 MC code, as well as use MCNP6 generated *phsp* with other codes for comparing and validating results.

Acknowledgements

This study was supported by the program “Ayudas para la promoción de empleo joven e implantación de la Garantía Juvenil en I+D+i, Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica e Innovación 2017-2020” from the “Iniciativa de Empleo Juvenil” (IEJ) and the “Fondo Social Europeo” (FSE).

Declaration of interest

The authors report no conflicts of interest. The authors are only responsible for the content of the paper.

References

- Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, Asai M, Axen D, Banerjee S, Barrand G, Behner F, Bellagamba L, Boudreau J, Broglia L, Brunengo A et al. (Geant4 Collaboration). 2003. GEANT4—A simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 506:250–303.
- Brualla L, Salvat F, Palanco-Zamora R. 2009. Efficient Monte Carlo simulation of multileaf collimators using geometry-related variance reduction techniques. *Phys Med Biol* 54: 4131-4149.
- Capote R, 2006. Phase-Space Database for External Beam Radiotherapy. IAEA-2006, International Atomic Energy Agency.
- Cortés-Giraldo MA, Quesada JM, Gallardo MI, Capote. 2012. An implementation to read and write IAEA phase-space files in GEANT4-based simulations. *International Journal of Radiation Biology* 88(1–2): 200–208.
- Dassault Systemes 3D Experience Company. 2014. ABAQUS 6.14, ABAQUS/CAE User’s Guide.
- European Commission. Open Innovation Open Science Open to the World, 2016.
- European Commission. Goals of research and innovation policy. <https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/strategy/goals-research-and-innovation-policy>. Accessed: 2022-03-16.
- Giménez-Alventosa V, Giménez V, Ballester F, Vijande J, Andreo P. 2020 Monte Carlo calculation of beam quality correction factors for PTW cylindrical ionization chambers in photon beams. *Phys. Med. Biol.* 65 205005

- Goorley T, James M, Booth T, Brown F, Bull J, Cox LJ, Durkee J, Elson J, Fensin M, Forster Ra et al. 2012. Initial MCNP6 Release Overview. Nucl Tech 180:298–315.
- IAEA NACP Nuclear Data Section, Phase-space database for external beam radiotherapy (Accessed March 2020) url: <https://www-nds.iaea.org/phsp/phsp.htmlx>
- IAEA Nuclear Data Section. 2006. Phase-Space Database for External Beam Radiotherapy. IAEA report. VarianClinac600C6MV.pdf. Available online at <http://www-nds.iaea.org/phsp/>. IAEA Vienna (Accessed May 2020).
- International Atomic Energy Agency. 2005. Implementation of the international code of practice on dosimetry in radiotherapy (*TRS 398*)
- Kawrakow I, Mainegra-Hing E, Rogers DWO, Tessier F. 2017. The EGSnrc Code System: Monte Carlo simulation of electron and photon transport. Technical Report PIRS-701. National Research Council Canada.
- Los Alamos Scientific Laboratory. Group X-6. 1979. MCNP: a General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport. Los Alamos, N. M. Dept. of Energy, Los Alamos Scientific Laboratory.
- Low Daniel A., Harms William B., Mutic S., Purdy James A. 1998. A technique for the quantitative evaluation of dose distributions. Med. Phys. 25 (5).
- Morató S, Juste B, Miró R, Verdú G. 2017. Varian Clinac 6 MeV Photon Spectra Unfolding using a Monte Carlo Meshed Model. EPJ Web of Conferences 153, 04012. ICRS-13 & RPSD-2016.
- Public library of science. <https://www.plos.org/>. Accessed: 2022-03-15
- Rogers DWO. 2006. Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics. Phys Med Biol 51:R287–301.
- Salvat F. 2019. Penelope 2018: A code System for Monte Carlo Simula-tion of Electron and Photon Transport, OECD/NEA Data Bank, Issy-les-Moulineaux, France. Available from <http://www.nea.fr/lists/penelope.html>
- Sempau J, Badal A, Brualla L. 2011. A PENELOPE-based system for the automated Monte Carlo simulation of clinacs and voxelized geometries application to far-from-axis fields. Med Phys 38(11).
- Sheikh-Bagheri D, Rogers DW. 2002. Monte Carlo calculation of nine mega-voltage photon beam spectra using the beam code. Med Phys 29(3):391–402.
- Verhaegen F, Seuntjens J. 2003. Monte Carlo modelling of external radio-therapy photon beams. Phys Med Biol 48:R107–R164.
- Werner CJ (editor). 2017. MCNP Users Manual - Code Version 6.2. Los Alamos National Laboratory, report LA-UR-17-29981.
- Werner CJ, Bull J, Jeffrey S, Solomon CJ, Brown FB, McKinney GW, Rising ME, Dixon DA, Martz RL, Hughes HG et al., 2018. MCNP6.2 Release Notes. Los Alamos National Laboratory, report LA-UR-18-20808.

II.2 Filtre aplanador per a IOeRT d'alta energia.

Referència: S. Oliver, J. Vijande, N. Tejedor-Aguilar, R. Miró, Juan J. Rovira-Escutia, F. Ballester, B. Juste, V. Carmona, G. Felici, G. Verdú, E. Sanchis, A. Conde, J. Pérez-Calatayud: **Monte Carlo flattening filter design to high energy intra-operative electron beam homogenization** *Radiation Physics and Chemistry*, 212, 111102 (2023). Elsevier
<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2023.111102>

Categoria JCR: NUCLEAR SCIENCE AND TECHNOLOGY

Posició: 3/34

Quartil: Q1

Factor d'impacte (2022): 2.9

II.2.1 Introducció i motivació.

En els darrers anys, s'ha establert una nova modalitat de radioteràpia, la IOeRT. Tal i com s'ha descrit a la Secció I.2.2.2, aquesta, consisteix en subministrar una elevada dosi directament a les cel·les residuals tumorals, durant la cirurgia d'extirpació del tumor.

Degut a que aquests acceleradors disposen de diferents aplicadors i poden emetre amb diferents energies de feix, la IOeRT s'indica per a un gran tipus de malignitats en diferents parts del cos. En alguns casos concrets, és necessari emprar camps grans uniformes, per tal de cobrir tota la zona tumoral i, a més, tot i que l'escenari més comú de la IOeRT és l'enfoc profilàctic on s'irradia la regió del tumor després de l'extirpació, en alguns casos, és necessari emprar energies més altes del feix per eliminar tot el possible les cel·les tumorals residuals. Si més però, quan s'empren camps grans combinats amb energies de feix elevades, s'observa una disminució de la uniformitat del perfil de dosi, en comparació amb el que es mesura per a camps més menuts i energies més baixes. Amb tot açò, la motivació que ha donat lloc a aquest estudi, ha sigut aconseguir un feix uniforme, en els casos en que es combinen camps grans d'irradiació i energies elevades del feix.

II.2.2 Objectius de l'estudi.

Per poder donar solució al problema plantejat, l'objectiu d'aquest treball és dissenyar, construir i validar experimentalment, un filtre aplanador que, col·locat en la part superior de l'aplicador de 10 cm de diàmetre, siga capaç de solucionar la disminució de la uniformitat del feix en les condicions esmenades.

II.2.3 Materials i mètodes.

II.2.3.1 Accelerador de IOeRT.

Existeixen diferents cases comercials que distribueixen acceleradors de IOeRT. El model més estès a Espanya, és l'accelerador mòbil LIAC HWL (SIT, Sordina IORT Technologies, Vicenza, Italy) [136, 137]. El LIAC, és el model que s'ha emprat en aquest estudi, ja que és el que es troba a l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València, amb qui s'ha col·laborat per a dur a terme el treball. Les seues característiques principals s'han descrit a la secció

I.2.2.2 i una imatge de l'aplicador de 10 cm de diàmetre, anomenat A10 d'ara en avant al text, es mostra a la Figura II.2.

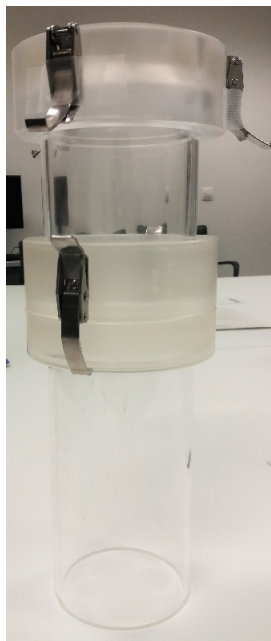


Figura II.2: Aplicador de 10 cm de diàmetre que es col·loca a l'eixida del feix del LIAC i amb el qual s'ha treballat en l'article presentat.

II.2.3.2 Simulacions de Monte Carlo.

És ben conegut, que les simulacions de MC ofereixen un dels mètodes més eficients referent a cost econòmic i precisió de càlcul de dosi, per determinar els requisits geomètrics d'una estructura de filtratge [138, 114]. Per eixe motiu, i perquè ja s'han emprat aquests mètodes anteriorment amb excel·lents resultats [32, 30, 139], es decideix dissenyar el filtre emprant simulacions de MC.

Degut a la rellevància en l'àmbit d'aplicació d'aquest filtre, per descartar qualsevol tipus d'inconsistència i determinar possibles fonts d'incerteses de tipus B relacionades amb les simulacions MC, en el desenvolupament d'aquest estudi, es van emprar dos codis de manera independent per dos grups de recerca diferents. El grup de recerca, expert en simulacions MC, amb qui es va col·laborar, va ser del Departament de Física Atòmica, Molecular i Nuclear de la Universitat de València, on es va emprar el codi penEasy (v20200325) [91], mentre que al grup ISIRYM de la Universitat Politècnica de València, vam emprar el codi MCNP6 v.2 [89].

Les condicions i paràmetres de les simulacions, es van triar d'igual manera en ambdós codis. Els detalls referents a la geometria, es presenten a la Taula II.3 i Figura II.3, mentre que els referents a la font i els paràmetres de simulació, així com un resum d'altres condicions de simulació es detallen a la Taula II.4.

II.2.3.2.1 Comprovacions inicials.

El primer pas del treball va consistir en reproduir els resultats observats experimentalment, quan s'empren camps grans i feixos de 12 MeV d'energia, és a dir, la no homogeneïtat del feix. A més, es va comprovar que la construcció de la geometria en ambdós codis, així com

Taula II.3: Resum de la geometria de les simulacions Monte Carlo

Element	Descripció
Aplicador	A10 (diàmetre de 10 cm)
Maniquí d'aigua	$20 \times 20 \times 20 \text{ cm}^3$
Materials modelats	A10 de PMMA ($\rho = 1.19 \text{ g/cm}^3$) Aigua estàndard ICRU 90 [112])

Taula II.4: Resum de les principals característiques de les simulacions Monte Carlo realitzades en aquest treball.

Ítem	Descripció	Referències
Codi	MCNP6.2 penEasy (v20200325)	[89, 99] [74, 91]
Validació	Prèviament validat	[140, 99, 132, 133]
Execució	AMD Opteron(TM) Processor 6272: MCNP6.2 108 hores de CPU	
Descripció de la font	PSF feix e^- de 12 MeV de SIT (Sordina) just a l'eixida del capçal de l'accelerador	[141]
Seccions eficaces	MCNP: MCPLIB84, EL03 penEasy: Fotoelèctric des de PHOTACS Compton des de l'aproximació de l'impuls relativista. Dispersió de Rayleigh emprant la teoria de pertorbació no relativista Relaxació atòmica amb les transicions de probabilitat EADL	[94, 95, 96, 97] [104, 105] [103] [102] [106, 107, 108]
Paràmetres del transport	$E_{tall}^e = 200 \text{ KeV}$, $E_{tall}^f = 10 \text{ KeV}$ en tots els materials.	
Tècniques de reducció de variància	Divisió de partícules en les fonts de PSF.	[75, 98, 99], [74, 91]
Quantitats registrades	Dosi absorbida en el maniquí d'aigua.	
Incertesa	Tipus A $\leq 0.1\%$ ($k=2$) Entre codis MC $\leq 2\%$ Combinada 2% ($k=2$)	[142]
Post-processat	Cap	

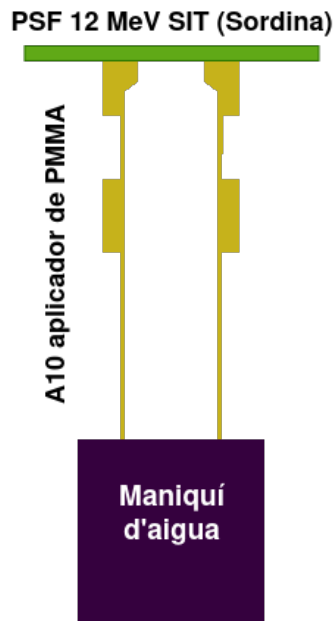


Figura II.3: Tall de la geometria de les simulacions de l'aplicador A10 del LIAC.

l'elecció dels paràmetres i materials, era correcta i igual en ambdós casos. Per fer això, es van calcular les corbes de dosi en profunditat, així com el perfil de dosi a z_{max} , tant amb els codis MC, com experimentalment en un maniquí d'aigua MP3 (PTW-Freiburg, Germany) amb una càmera d'ionització de PTW (31010 Semiflex) i un diode E tipus 60012. Tota la part experimental, es va dur a terme per professionals de l'Hospital La Fe.

II.2.3.2 Disseny del filtre aplanador.

El procés de disseny, es va realitzar un cop validades les corbes de dosi. En primer lloc, es van realitzar un conjunt de simulacions, en les que es va anar afegint cilindres de diferent espessor, per tal d'avaluar el seu efecte dosimètric. Es va analitzar aleshores, quina combinació de cilindres amb diferents radis i espessor, oferia una uniformitat global del feix. El darrer pas, va implicar combinar-los en un con per facilitar la construcció, que es va realitzar en una impressora 3D Prusa MK3s+ (Prusa Research, Prague, Czech Republic), emprant el material Fervi 3D PLA Esencial (polylactic acid) (Alicante, Spain), amb una densitat de 1.3 g/cm^3 .

II.2.3.3 Validació experimental del filtre dissenyat.

Per dur a terme la validació experimental del filtre dissenyat, es van realitzar mesures de les Percentatge de Dosi en Profunditat, *Percentage Depth Dose* (PDD), els perfils de dosi i la dosi absoluta i perifèrica. Les mesures descrites, es van realitzar amb el A10 original, i amb un segon A10 proporcionat pel fabricant, al qual se li va afegir el filtre dissenyat. Així, es va poder avaluar l'impacte en la dosi quan s'incorpora el filtre en l'aplicador.

Per obtenir les PDDs i les dosis absolutes, es va emprar un maniquí d'aigua MP1 de PTW (PTW-Freiburg, Germany) i una càmera d'ionització 'Advanced Markus' tipus 34045 amb un diode E tipus 60017, col·locada a 1.7 cm de profunditat, que correspon amb el z_{max} de

la configuració original. Ambdós detectors es van acoblar a un electròmetre T10008 Unidos (PTW, Freiburg).

A més, es va mesurar el factor d'atenuació del feix com la diferència relativa de les mesures mitjanes de dosis absoluta per a l'aplicador original i l'aplicador amb filtre. Es va calcular també el desplaçament mesurat a les PDD de la manera següent:

$$z_{A10_{original}}(D50) - z_{A10_{filtre}}(D50)$$

Finalment, per verificar l'impacte del filtre, es van utilitzar fragments de pel·lícula GAFChromic EBT3 (Ashland Inc., Bridgewater, NJ, USA). Un fragment es va irradiar emprant l'aplicador A10 original, mentre que l'altre es va irradiar emprant l'aplicador A10 amb el filtre incorporat, sent tots dos analitzats posteriorment per obtenir valors de dosi mitjançant l'aplicació web de Radiochromic.com (Radiochromic SL, Benifaió, Spain) [143]. Aquest mètode, va permetre obtenir perfils de dosi en ambdós casos.

Tal i com ja s'ha comentat anteriorment, un dels avantatges principals d'aquest model d'accelerador, és que s'ha dissenyat de tal forma que la radiació dispersa siga mínima. Per tant, s'ha de verificar que el fet d'afegir aquest filtre, no involucra un augment de radiació per *bremsstrahlung*, mantenint aquest avantatge de l'accelerador. Per verificar-ho, es van realitzar mesures de dosi perifèrica amb i sense filtre. Aquestes van consistir en tres irradiacions de 300 unitats monitor, en un maniquí d'aigua sòlida en cada cas. Les mesures de taxa de dosi màxima, es van realitzar a 3 m de distància amb un INOVION 451 (Fluke Biomedical, EUA), una configuració que ja s'havia emprat en treball previ [144]. A partir de les mesures, es va obtenir el quocient de la mitjana de la mesura de taxa de dosi màxima entre ambdós aplicadors, amb una incertesa estadística inferior al 2%.

II.2.4 Resultats.

II.2.4.1 Simulacions de Monte Carlo.

II.2.4.1.1 Comprovacions inicials.

Pel que fa a les simulacions de MC amb ambdós codis, realitzades amb l'aplicador A10 original, totes es van dur a terme amb una incertesa de tipus A inferior al 4% ($k = 2$), mostrant resultats compatibles en tots els punts i amb diferències inferiors a l'1% al z_{max} (1.7 cm). Comparant aquests resultats amb els mesurats experimentalment, també amb l'aplicador A10 original, estos van mostrar ser també compatibles, estimant una incertesa combinada tipus A i B del 4% ($k = 2$) a les mesures experimentals. Els resultats d'aquestes comprovacions inicials es mostren a la Figura II.4, els quals verifiquen la correcta configuració de les simulacions pel que fa a construcció de la geometria, assignació de materials i paràmetres de simulació.

II.2.4.1.2 Disseny del filtre aplanador.

Durant el procés iteratiu realitzat amb simulacions i explicat a la secció II.2.3.2.2, per obtenir el disseny final del filtre, es van analitzar els perfils de dosi a la profunditat de màxima dosi, així com a les proximitats d'aquest punt. Tant amb MCNP6 com penEasy, es va concloure que un filtre en forma de con amb una alçada de 1.3 mm, situat a 3 cm de la part superior de l'aplicador, Figura II.5, produeix un perfil de dosi pla a 1.7 cm de la superfície del maniquí d'aigua, que coincideix amb el z_{max} de la configuració original del l'aplicador A10.

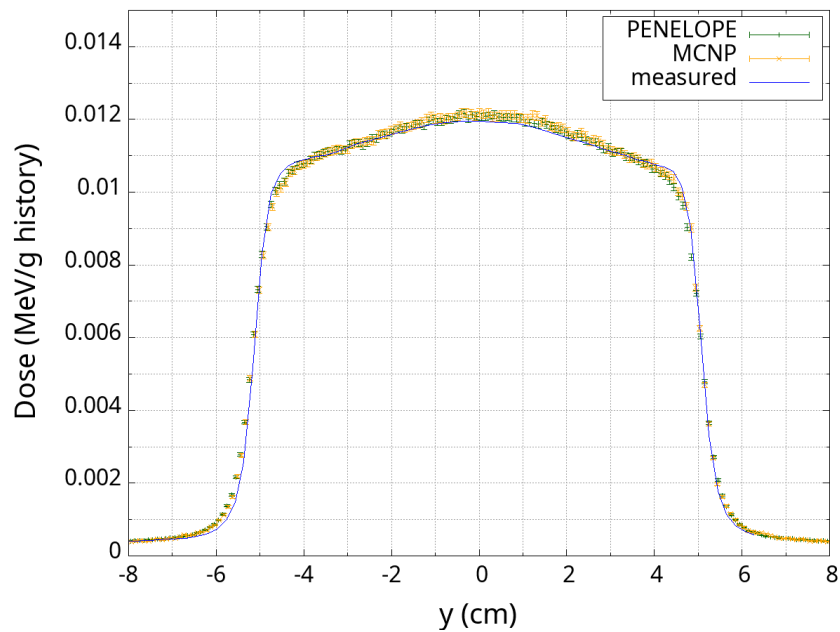


Figura II.4: Comparació del perfil de dosi en l'eix transversal al feix de radiació entre els dos codis de MC emprats, MCNP6.2 i penEasy/PENELOPE i les mesures experimentals. Comprovació del fet que la dosi no és homogènia en la part central del feix, sinó que és major en el centre que en la perifèria.

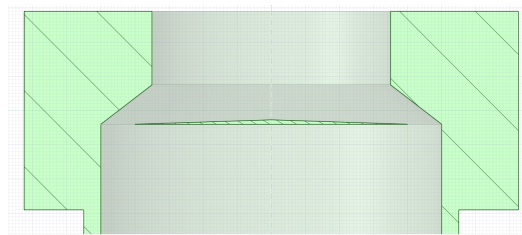


Figura II.5: Con aplanador dissenyat amb simulació Monte Carlo.

Una vegada es va afegir el filtre, imprès amb impressora 3D, al segon aplicador A10, es van realitzar mesures experimentals de les corbes de dosi, per comparar-los amb les obtingudes amb simulació MC. Els resultats de la comparació mostren ser estadísticament compatibles dins de la incertesa combinada de MC del 2% ($k = 2$), i la incertesa combinada estimada per a les dades experimentals del 4% ($k = 2$).

II.2.4.2 Validació experimental del filtre, impacte sobre el feix clínic i sobre la radiació dispersa.

Els resultats de les mesures, confirmen la millora en la uniformitat del feix, és a dir, de la diferència entre el D_{max} i D_{min} del perfil. Este valor s'ha reduït d'un 5.9% amb l'aplicador original fins a un 1.6% quan s'afegeix el filtre. Respecte a la comparació de la dosi absoluta en l'eix central, tant els resultats de les simulacions com de les pel·lícules radiocròmiques i l'acoblament 'Advanced Markus' i diode E, mostren que, al afegir el filtre, la dosi es redueix en un 16%. D'altra part, la PDD mesurada amb el filtre, es veu desplaçada 0.11 cm per al punt de D50.

Finalment, en les mesures que es van realitzar per estudiar si la nova configuració de l'aplicador afectava a la radiació dispersa, es va obtindre a 3 m, un valor un 2.6% major que amb la configuració original. No obstant, el valor mesurat amb l'aplicador original és de $0.13\mu Sv/Gy$, sent $0.2\mu Sv/Gy$ el valor nominal indicat pel fabricant. A més, el fabricant inclou una incertesa associada d'un 20%, per tant, l'augment de la radiació dispersa mesurada amb l'aplicador amb filtre, continua per sota del valor nominal del fabricant, i és negligible quan es consideren les incerteses experimentals. Així doncs, es valida que l'ús del filtre en l'aplicador A10 no ocasiona un problema de protecció radiològica, i pot ser proposat per emprar-se a la clínica.

II.2.5 Article.

A continuació s'adjunta la versió d'autor de l'article original d'aquest treball, on es troben tots els detalls i bibliografia corresponent.

Monte Carlo flattening filter design to high energy intraoperative electron beam homogenization

S. Oliver^{1*}, J. Vijande^{2,3,4}, N. Tejedor-Aguilar⁶, R. Miró¹, Juan J. Rovira-Escutia⁵, F. Ballester^{2,4}, B. Juste¹, V. Carmona⁶, G. Felici⁷, G. Verdú¹, E. Sanchis^{4,9}, A. Conde⁶, J. Pérez-Calatayud^{6,8,4}

¹Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM). Universitat Politècnica de València. Camí de Vera s/n. 46022. València, Spain.

²Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universitat de Valencia (UV), Burjassot, Spain

³Instituto de Física Corpuscular, IFIC (UV-CSIC), Burjassot, Spain

⁴Unidad Mixta de Investigación en Radiofísica e Instrumentación Nuclear en Medicina (IRIMED), Instituto de Investigación Sanitaria La Fe (IIS-La Fe) - Universitat de Valencia (UV), València, Spain.

⁵Centro Nacional de Dosimetría, Instituto Nacional de Gestión Sanitaria, Av. Campanar 21, Valencia, 46009, Spain

⁶Radiotherapy Department. Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València, València, Spain.

⁷S.I.T. – Sordina IORT Technologies SpA, Vicenza, Italy

⁸Radiotherapy Department. Clínica Benidorm Alicante, Spain.

⁹Department of Electronic Engineering, University of Valencia, Spain

*Corresponding author: gverdu@iqn.upv.es

Abstract

Intraoperative radiotherapy using mobile linear accelerators is used for a wide variety of malignancies. However, when large fields are used in combination with high energies, a deterioration of the flatness dose profile is measured with respect to smaller fields and lower energies. Indeed, for the LIAC HWL of Sordina, this deterioration is observed for the 12 MeV beam combined with 10 cm (or larger) diameter applicator. Aimed to solve this problem, a flattening filter has been designed and validated evaluating the feasibility of its usage at the upper part of the applicator. The design of the filter was based on Monte Carlo simulations because of its accuracy in modeling components of clinical devices, among other purposes. The LIAC 10 cm diameter applicator was modeled and simulated independently by two different research groups using two different MC codes, reproducing the heterogeneity of the 12 MeV energy beam. Then, an iterative process of filter design was carried out. Finally, the MC designed conical filter with the optimal size and height to obtain the desired flattened beam was built in-house using a 3D printer. During the experimental validation of the applicator-filter, percentage depth dose, beam profiles, absolute and peripheral dose measurements were performed to demonstrate the effectiveness of the filter addition in the applicator. These measurements conclude that the beam has been flattened, from 5.9% with the standard configuration to 1.6% for the configuration with the filter, without significant increase of the peripheral dose. Consequently, the new filter-applicator LIAC configuration can be used also in a conventional surgery room. A reduction of 16 % of the output dose and a reduction of 1.1 mm in the D_{50} of the percentage depth dose was measured with respect to the original configuration. This work is a proof-of-concept that demonstrates that it is possible to add a filter able to flatten the beam delivered by the Sordina LIAC HWL. Future studies will focus on more refined technical solutions fully compatible with the integrity of the applicator, including its sterilization, to be safely introduced in the clinical practice.

Keywords: Intraoperative radiotherapy, electron portable LinAc, flattening filter, dosimetry, Monte Carlo

1 Introduction

Intraoperative electron radiotherapy (IOERT) is a technique that consists in delivering a single high radiation dose to the residual tumor or tumor bed during surgery. The direct visualization of the area exposed allows the precise localization and targeted

delivery of high dose radiation to the tumor bed while minimizing the exposure of surrounding normal tissue that are displaced away from the tumor bed or shielded during the irradiation. Therefore, the dose escalation without increasing normal tissue complications results in an improvement of the therapeutic ratio [1], [2], [3].

The use of mobile linear accelerators has led IOeRT to become a widespread technique. This is due to the fact that these accelerators can be employed in a conventional surgery room without any additional shielding considerations. This eliminates the need of moving the patient to a different shielded operating room maintaining the proper sterilization that is required during its transport [4].

IOeRT can be applied exclusively or as a boost in combination with fractionated external radiotherapy. This technique is indicated clinically for a wide variety of malignancies such as breast, lung, pancreas, gastric, central nervous system, head and neck, bile duct, bladder, colorectal, gynecologic, genitourinary, pediatrics, extremity and trunk soft-tissue, retroperitoneal and bone [5], [2].

One of the clinical indications for the use of IOeRT is the treatment of sarcomas. In these cases, the irradiation area is significantly large, so the largest applicator sizes have to be used. In fact, for some accelerator models there are special square and rectangular applicators for this type of treatment. In some cases, due to the huge dimensions of the treatment area it may be even necessary to join two radiation fields, leading to a geometric uncertainty and the underdosification or overdosification in the junction of both fields.

The most common scenario in IOeRT is the prophylactic one, that is, the irradiation of the tumoral bed following removal of the tumor during surgery. However, in some cases, residual tumor may remain due to the proximity of critical organs or the difficulty of the intervention itself. Therefore, the treatment depth is greater and the highest energies available must be used. In the specific case of some accelerators, such as the one used in this study, the combination of large fields and high energies produces a deterioration of the flatness dose profile obtained with respect to lower energies and smaller fields.

The motivation for this work stems from the possibility of solving the loss in beam flatness obtained for large fields and high energies by using a flattening filter at the upper part of the applicator.

2 Material and methods

2.1 Mobile linac

LIAC HWL (SIT, Sordina IORT Technologies, Vicenza, Italy) is a mobile accelerator for intraoperative radiotherapy treatments [6], [7]. This model has been designed to minimize stray radiation ($< 0.2 \mu\text{Sv}/\text{Gy}$ in patient plane at a distance of 3 m) [8], allowing a workload higher than 100 Gy/week according to NCRP 151 standard [9]. Therefore, the only structural barrier required is the beam stopper in order to protect downward areas. The previous characteristics, together with its light weight and small dimensions, allow it to be used in a conventional operating room. The LIAC HWL available at the Hospital Universitari i Politècnic La Fe of València is the 12 MeV model, which allows the use of four energies: 6 MeV, 8 MeV, 10 MeV and 12 MeV.

Collimation of the radiation beam is achieved by cylindrical-shaped PMMA applicators, which consist of two parts (upper and lower) connected by a hard docking junction. The overall applicator length is 40 cm and the diameter size ranges from 30 mm to 100 mm. There are four different bevel angles available (0° , 15° , 30° , 45°).

2.2 Monte Carlo simulations

Monte Carlo (MC) simulations have become the gold standard for many applications in the field of medical physics, such as radiation protection, treatment planning systems or the design of clinical systems, among others. In particular, they offer one of the best and more cost-efficient methods to determine the geometrical requirements of a filtering structure [10], [11]. Therefore, these techniques have been widely applied when designing flattening filters in photon-based radiotherapy [12], [13] and to a lesser extent in electron-based ones [14]. In this work, state-of-the-art MC simulations have been used to design a specific filter tailored to flatten the beam produced by the aforementioned LIAC. As a proof of concept, the specific scenario for large fields and greater prescription depths, that force the use of higher beam energies in clinical practice have been considered, namely 10 cm in diameter and 12 MeV.

To rule out any possible inconsistency and also to determine the relevance of any possible source of Type B uncertainties related with the MC

simulations, two different MC codes were used independently by two different research groups. Notice that Type B uncertainties referred to those that are estimated using some means other than statistical treatment of the results, while Type A uncertainties refers to any method for evaluating uncertainty using statistical analysis of a series of observations. The codes used for this purpose were, penEasy (v20200325) [15], a modular code for the PENELOPE2018 system [16] and MCNP6 (version 2) [17]. Those MC codes have been extensively described and benchmarked in the literature [18], [19].

For both codes, the particle source of the simulation was the electron 12 MeV phase space file (PSF) provided by the manufacturer at the exit of the LinAc head [20] located just before the mobile LinAc applicator. The dimensions of 10 cm in diameter applicator (A10) were measured using a caliper (having a precision of 0.005 cm) and modeled into the simulation together with a $20 \times 20 \times 20 \text{ cm}^3$ water phantom placed in contact with A10. The depth dose and the dose profile curves along the water tank were tallied using a voxel size of 1 mm^3 for both MC codes. Dose profile was obtained at the maximum of the depth dose, which is achieved at 17 mm from the water tank surface. The applicator and the filter are modeled as PMMA (density of 1.19 g cm^{-3}), while the phantom as standard water [21]. All the simulations were performed considering a cut-off energy of 200 keV for electrons and 10 keV for secondary photons in all materials. These ones are scattered photons produced mostly by bremsstrahlung. Characteristic X-rays and photons due to electron-positron annihilation are also present, but in a smaller numbers. Type A uncertainties of about 0.1% ($k=2$) were achieved, where $k=2$ produces an interval with a level of confidence of approximately 95%. Differences between MC codes reported for different 12 MeV electron beams are in the range of 2% or lower for the depth dose and the dose profile [22] outside of the penumbra region. These results allow estimating a conservative combined uncertainty of 2% ($k=2$) for the MC simulations.

2.3 Monte Carlo validation and filter design for LIAC 12 MeV electron beam and A10

As it will be shown in the next section 2.3, Fig. 4, the inhomogeneous profile at the maximum of the depth dose shows higher dose absorption at the center of the

radiation field than in its periphery. Therefore, a conical filter was considered to be the best candidate to be added to the original applicator geometry.

The first step was to ensure the correctness of the applicator geometry and the corresponding material assignment in both MC codes. To do so, the depth dose and dose profile curves calculated in the water tank were compared with experimental data measured at the Hospital Universitari i Politècnic La Fe. The experimental measurements were carried out in an MP3 water tank (PTW-Freiburg, Germany) using a reference chamber of PTW (31010 Semiflex) and E Diode type 60012. The beam used for MC validation was 12 MeV PSF at the exit of the linac head containing both electron a photon particles which is collimated with the A10.

Once the dose curves of both MC codes were validated, an iterative process of filter design was carried out. First, a set of simulations adding cylinders of variable thickness were performed to evaluate their dosimetric effect. Once this information was available, a combination of cylinders with different radii and thickness was explored to achieve global flatness. The last step implied combining those into a cone for ease of construction.

Finally, the MC designed filter with the optimal size and height to obtain a flattened beam at 17 mm from the water tank surface was manufactured in-house using a 3D printer Prusa MK3s+ (Prusa Research, Prague, Czech Republic) using Fervi 3D Pla Especial (polylactic acid) (Alicante, Spain) with a density of about 1.3 g cm^{-3} . The nozzle used was the standard one provided, having a size of 0.4 mm. Using this nozzle, layer heights between 0.05 and 0.35 mm were achievable, although heights below 0.1 mm proved difficult to be obtained without imperfections. Dimensions were checked using a Mitutoyo QV Accel 808 (Mitutoyo Europe GmbH, Neuss, Germany) measuring system up to a tolerance of 50 μm . Minor modifications were required afterwards to improve its robustness and stability once installed in the applicator.

2.4 Filter experimental validation and impact on clinical beam

To demonstrate the effectiveness of the designed filter this section describes the experimental measurements carried out with the standard and flattening filter A10 with no bevel.

Percentage depth dose (PDD), beam profiles, absolute and peripheral dose measurements for a 12 MeV electron beam were performed for the standard and flattening filter applicator to evaluate the possible impact of the filter on the depth dose.

2.4.1. Experimental setup

PDDs and absolute dose measurements were carried out in an MP1 water tank (PTW-Freiburg, Germany). The commissioning measurements were carried out with the recommended detectors, namely the ionisation chambers and the electron diode. Absolute dose measurements for 500 monitor units (MU) beam irradiation were conducted with either Advanced Markus chamber type 34045 and E Diode type 60017 at 17 mm depth. Both detectors were coupled to a T10008 Unidos electrometer (PTW, Freiburg).

Attenuation factor was determined as the relative difference of the average absolute dose measurements for the standard and flattening filter design applicator. PDDs were measured from water surface to a depth of 8 cm along the central axis using Advanced Markus chamber. Data measurements were analyzed by Mephysto software (PTW, Freiburg). Measured shift in PDD curves ($z_{\text{standard}}(D_{50}) - z_{\text{filter}}(D_{50})$) was calculated. The experimental setup is the same as described before.

For the verification of the impact of the filter, pieces of GAFChromic EBT3 film (Ashland Inc., Bridgewater, NJ, USA) were used, which allows to obtain the dose profiles at zero depth of the water tank to evaluate the variation in the low energy electron components.

2.4.2. Measurements for experimental validation

To obtain radiation dose profiles, two pieces of GAFChromic EBT3 were exposed to 330 MU to deliver approximately 3 Gy, at a depth of 17 mm in a RW3 solid water phantom. One film was irradiated using the applicator with the flattening filter, while the other was irradiated with the standard applicator. The films were handled, scanned and calibrated in accordance with the protocol detailed by Méndez et al. [23]. Calibration was conducted using seven slices of film irradiated with the LIAC HWL to deliver absorbed doses ranging from 0 to 3.5 Gy. Film doses

were obtained using the radiochromic film dosimetry web application, Radiochromic.com (Radiochromic SL, Benifaió, Spain), which converts film images into doses using the Multigaussian model [24]. An Epson Expression 12000XL flatbed scanner manufactured by Seiko Epson Corporation (Nagano, Japan) was employed for scanning. The estimated combined uncertainty for the experimental data was 4% ($k=2$).

Finally, the beam flatness defined as half of the difference between the maximum and minimum dose values across the 80% of the field size, was measured.

2.5 Filter impact on stray dose

As mentioned before, one of the main features of the LIAC HWL mobile linac is that has been designed to minimize stray radiation. Therefore, peripheral dose measurements were performed in order to verify that the addition of the filter into the applicator does not cause any change in the amount of bremsstrahlung radiation generated during beam irradiation. Three irradiations of 300 MU on solid water phantom were performed for each applicator. Maximum dose rate measurements were performed at 3 m distance with a INOVION 451 survey meter (Fluke Biomedical, USA). In front of the detector, 5 cm solid water slabs were placed to shield the leakage low energy electrons. The experimental setup for these measurements was the same that in a previous work [25]. The ratio of the average maximum dose rate measurement between both applicators was obtained. The statistical uncertainty of the ratio was lower than 2%.

3 Results

3.1 Monte Carlo validation and filter design

First, the simulations with no filter have been carried out with a Type A uncertainty lesser of 4% ($k=2$) in the region of interest for both codes. These ones shown agreement within the uncertainties, differences smaller than 1% at the maximum of the depth dose. In addition, taking into account an estimated Type A and B combined uncertainty of 4% ($k=2$) for the experimental measurements, the MC simulations have been provided compatible results. Therefore, it was established that both MC codes

reproduce the experimental data, validating the simulation parameters used and the applicator geometry and material assignment.

Then, to obtain the final design of the filter, the dose profiles at the maximum of the depth dose and its proximities were analyzed. Finally, both codes conclude that a conical filter with 1.3 mm of height located at 3 cm from the top of the upper part of the applicator produces a flat dose profile at 17 mm from the water tank surface. The depth dose and dose profiles values obtained using the simulated final filter show that results of both codes are compatible within the MC uncertainties. These MC-based doses were also compared with the experimental depth dose curve and dose profiles. In both cases MCNP and penEasy/PENELOPE simulations are in good agreement with the experimental results within MC combined uncertainty of 2% ($k=2$) and combined uncertainty estimated for experimental data of 4% ($k=2$).

The final filter profile together with the experimental verification of the dimensions of the printed versions are shown in Fig. 1.

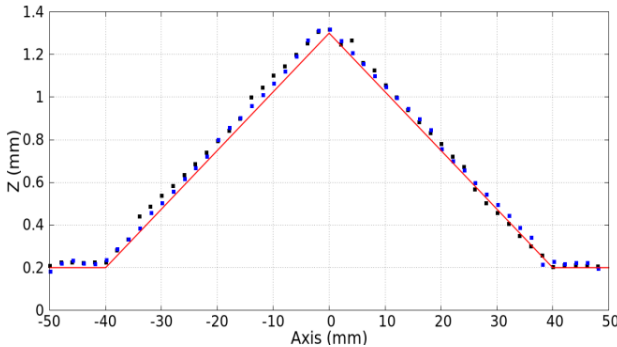


Figure 1: Lateral profile of the conic filter designed. Red solid line corresponds to the MC geometry implemented in the simulation. Dots correspond to the experimental measurements performed as described in Section 2.4. Black dots correspond to measurements along the Y axis and blue ones along the X axis. The grid dimensions are not the same.

Fig. 2 shows the final filter design printed in PLA with the 3D printer Prusa MK3s+. The filter has been embedded in the upper part of A10 to perform the experimental validation. The location of the filter is the one used for the MC simulations. Fig. 3 shows both, the applicator with the designed filter and the standard applicator. The filter is located on top of the conical indentation inside the applicator. Being printed with the exact inner dimensions of the applicator it remains in place without using any

additional measure independently of the orientation of the device.



Figure 2: Printed PLA (density of about 1.3 g cm^{-3}) designed filter which has been added to the A10 LIAC. The filter presents a conical shape with 1.3 mm height at the center.



Figure 3: The two upper part of the A10 of the LIAC used in this work. The top image shows the top view of both A10, with the designed filter embedded and the standard one. The bottom image shows the opposite view.

3.2 Experimental validation of the filter and impact on the clinical beam

For each applicator configuration, Fig. 4 shows the experimental dose profiles obtained by averaging the dose values of every point of the irradiated film at the same distance from the beam center. The dose average values and their corresponding standard deviations, also plotted in Fig. 4, confirm the cylindrical symmetry of the flattening filter. Beam flatness obtained was 5.9% and 1.6% for the standard applicator and the applicator with flattening filter, respectively.

To better show the dose profile results, only half-profiles are displayed in Fig. 4. Moreover, for the sake of clarity and due to the agreement between MC codes, only penEasy/PENELOPE results are presented. Fig. 4 lower plot shows the experimental profile measured with the applicator-filter configuration and the MC profile obtained including the filter in the applicator.

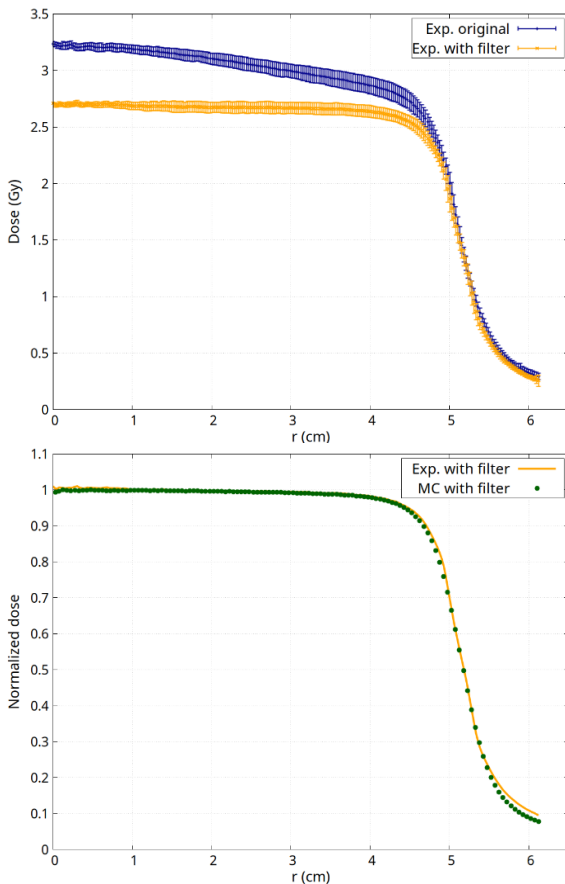


Figure 4: Experimental measures with the original LIAC configuration and with the addition of the filter, showing a 16% dose reduction in the center of the beam (top). Normalized experimental dose profile with filter and normalized MC dose

with filter (bottom). The combined uncertainty estimated for the experimental data is of 4% ($k=2$), and for MC results is 2% ($k=2$). Error bars are not shown for the sake of clarity (bottom).

The combined Type A and B uncertainty estimated for the experimental data is 4% ($k=2$) and for the MC results is 2% ($k=2$).

In terms of the absolute dose comparison for both applicator configurations in the central axis ($r=0$ cm), MC, film, Advanced Markus and E Diode results show that a reduction of a 16% of the dose is produced due to the filter addition. Moreover, comparison of PDD results show 1.1 mm reduction in D_{50} due to the filter addition.

3.3 Filter impact on stray dose

Measurements performed at a distance of 3m using the standard applicator gives a value of $0.13 \mu\text{Sv/Gy}$, well below the nominal value stated by the manufacturer ($<0.2 \mu\text{Sv/Gy}$). It is interesting to note that the value provides by the manufacturer includes an associated uncertainty of about 20% due to different sources included in the set-up, calibration of the detector and small differences in the spectrum generated by the LIAC. Measurements performed using the modified applicator including the flattening filter gives a value 2.6% higher than the standard one, which is well below the manufacturer's nominal value and negligible when the typical experimental uncertainties are taken into account.

Such negligible increase in scattered radiation validates the potential use of the filter without generating a radiation protection issue.

4 Discussion

The feasibility of a flattening filter design has been evaluated for a LIAC mobile accelerators to solve the inhomogeneity problems for large fields and high energy beams. The filter addition technique has been widely used in other clinical devices. For example, in the case of the Leipzig applicators [26], [27] a filter was added to flatten the dose distribution, resulting in the Valencia applicators [13], both produced by Elekta Brachytherapy (Veenendaal, The Netherlands). This technique has been applied also for the Mobetron (Intraop Medical Corporation, Sunnyvale, CA) intraoperative linac sarcoma applicators [28]. In that study an additional scattering

foil was added on the top of a prototyped rectangular applicator to obtain the desired field flatness comparable with the standard A10.

In this work, following an analogous procedure, a prototype flattening filter has been added to the upper part of the A10 of the Sordina LIAC HWL accelerator available at the Hospital Universitari i Politècnic La Fe of València for the 12 MeV energy beam. The results of the case studied show a flat profile for the experimental measurements when the applicator-filter configuration is used. Notice that the dimensions of the designed filter depend on its materials, the energy beam and applicator size. Any modification of these parameters in the LIAC configuration would require a new process of MC simulation design and experimental validation of the resulting filter.

In addition to the homogeneity achieved in the beam due to the designed filter, the increase of the peripheral dose around the device is considered negligible. Therefore, the applicator-filter LIAC HWL configuration maintains the necessary conditions to be used in conventional operating rooms in the same way as the original ensemble.

Although the strategy of adding a flattening filter is not new in radiotherapy, the novelty of the present work lies in its application to the case of intraoperative radiotherapy using simple and inexpensive acrylic applicators. In the case of portable electron accelerators, such as the one considered in this work, the preservation of peripheral dose is fundamental given their use in unshielded rooms and the filter design is a challenge in the face of additional sources of scatter, such as a filter.

After initial testing, it turned out that a cone-shaped design was sufficient for homogenization purposes, avoiding more complex solutions (i.e. Gaussian shape, concentric rings ...) that would affect robustness and complicate manufacturing to a greater degree. For the design and verification of the filter it has been necessary to apply the Monte Carlo method given the complexity of the various components of the electron beam coming from the accelerator head and applicator, and no other more reliable and direct process has been found.

A possible limitation of this work is the complexity to accurately model the material available for constructing the filter. For all the simulations carried out the filter material has been assigned to PMMA

while the final printed filter was made of commercial PLA. The PLA is an organic material widely used in 3D printing, made from fermented plant starch from maize, corn or cassava, among others. Since the composition of the particular batch used cannot be known precisely, PMMA was used in the MC simulations due to the similarities between both plastics, as well as their relatively close density values. This simplification has been supported a posteriori by the experimental validation performed.

Since the Sordina LIAC HWL has not include equalizing filter, this work is a proof-of-concept of the feasibility of adding a flattening filter in a LIAC applicator, solving a clinical practical problem that authors have faced. It has been clearly demonstrated that it is possible to construct and add a filter with a relatively simple configuration able to flatten the beam delivered by the Sordina LIAC HWL, studying the implications both on the clinical beam and above all, on the peripheral dose, which is critical in this particular accelerator model. Prior to its use in clinical practice further studies are required focusing on more refined technical solutions fully compatible with the integrity of the applicator, including its sterilization.

Although this protocol should be repeated for any other applicator size and energy beam combination, the information gathered in this case offers a validated protocol that will facilitate any further development in that direction.

5 Conclusions

A flattening filter has been designed to homogenize the LIAC HWL 12 MeV energy beam with applicator of A10. To design it, a set of MC simulations were carried out to predict the dose distribution and beam flatness. MC methods allow to design a filter varying all possible parameters before its manufacturing saving both, time and resources. Then, the final designed filter was manufactured using a 3D printer. Experimental validation concludes that the beam flatness has improved from 5.9% to 1.6% with no significant (less than 2.6% and well within the maximum value provided by the manufacturer) increase of the peripheral dose. Moreover, PDD, beam profiles, absolute and peripheral dose have also been measured to demonstrate the effectiveness of the filter addition in the applicator. The study of the impact of the filter addition in the clinical beam shows a reduction of 16 % of the dose and a reduction of 1.1 mm in the D_{50} of the PDD in comparison with

the original configuration, which should be considered for future usage in the clinical practice.

Acknowledgments

We thank the professionals and facilities at the 3D printing and metrology department in the Mechanics Unit at IFIC. JV thanks I. Díaz for measuring the PLA density. We thank S.I.T. SORDINA IORT Technologies SpA for providing the applicator used for testing the filter during the measurements. JV, FB, and JP would like to acknowledge the Spanish “Ministerio de Ciencia e Innovación” (MCIN) grant PID2021-125096NB-I00 funded by MCIN/AEI/10.13039 and the “Generalitat Valenciana” (GVA) grant PROMETEO/2021/064.

References

- [1] A. Pilar, M. Gupta and S. Laskar, “Intraoperative radiotherapy: review of techniques and results,” *Ecancermedicalscience*, no. 11, p. 750, 2017.
- [2] F. A. Calvo, “Intraoperative irradiation: Precision medicine for quality cancer control promotion,” *Radiat. Oncol.*, vol. 12, no. 1, pp. 1-5, 2017.
- [3] E. Sanchis, S. Casans, R. García-Gil, J. Martos, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, M. J. Pérez-Calatayud and J. Pérez-Calatayud, “Improving bleeding detector features for electron intraoperative radiotherapy.,” *Phys. Med.*, vol. 65, pp. 150-156, 2019.
- [4] E. Sanchis, S. Casans, G. Felici, R. García-Gil, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, M. J. Pérez-Calatayud and J. Pérez-Calatayud, “Detector for monitoring potential bleeding during electron intraoperative radiotherapy.,” *Phys. Med.*, vol. 57, pp. 95-99, 2019.
- [5] L. Gunderson, C. Willett and F. Calvo, “Intraoperative irradiation. Techniques and results. 2th ed. Springer,” 2011.
- [6] P. Winkler, S. Odreitz-Stark, E. Haas, M. Thalhammer and R. Partl, “Commissioning, dosimetric characterization and machine performance assessment of the LIAC HWL mobile accelerator for Intraoperative Radiotherapy,” *Zeitschrift für Medizinische Physik*, vol. 30, no. 4, pp. 279-288, 2020.
- [7] E. Mastella, K. E. Szilagyi, E. De Guglielmo, S. Fabbri, F. Calderoni, A. Stefanelli, G. Di Domenico and A. Turra, “Dosimetric characterization of a mobile accelerator dedicated for intraoperative radiation therapy: Monte Carlo simulations and experimental validation,” *Physica Medica*, vol. 104, pp. 167-173, 2022.
- [8] “LIAC HWL Mobile Ioert Accelerator,” [Online]. Available: <https://www.soiort.com/products/liachwl/>. [Accessed 4 october 2022].
- [9] NCRP Report N°151, Structural Shielding Design and Evaluation for Megavoltage X- and Gamma-Ray Radiotherapy Facilities, National Council on Radiation Protection and Measurements, 2005.
- [10] E. Spezi, D. Lewis and S. C.W, “Monte Carlo simulation and dosimetric verification of radiotherapy beam modifiers,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 46, p. 3007, 2001.
- [11] F. Verhaegen and J. Seuntjens, “Monte Carlo modelling of external radiotherapy photon beams,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 48, p. R107, 2003.
- [12] R. C. McCall, R. D. McIntyre and W. G. Turnbull, “Improvement of linear accelerator depth-dose curves,” *Medical Physics*, vol. 5, no. 6, pp. 518-524, 1978.
- [13] D. Granero, J. Pérez-Calatayud, J. Gimeno, F. Ballester, E. Casal, V. Crispín and R. van der Laarse, “Design and evaluation of a HDR skin applicator with flattening filter,” *Medical Physics*, vol. 35, no. 2, pp. 495-503, 2008.
- [14] H.-H. Hsu, D. G. Vasilik and J. Cheng, “An optimal target-filter system for electron beam generated X-ray spectra,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 355, no. 2-3, pp. 641-644, 1995.
- [15] J. Sempau, A. Badal and L. Brualla, “A PENELOPE-based system for the automated Monte Carlo simulation of clinacs and voxelized geometries application to far-from-axis fields,” *Medical Physics*, vol. 38, no. 11, 2011.
- [16] F. Salvat, “Penelope 2018: A code System for Monte Carlo simulation of Electron and Photon Transport,” *OECD/NEAS Data Bank, Issys-les-Molineaux, France*, 2019.
- [17] Los Alamos Scientific Laboratory Group X-6, “MCNP: a General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport,” *Los Alamos, N. M. Dept. of Energy, Los Alamos Scientific Laboratory*, 1979.
- [18] J. Sempau, J. Fernández-Varea, E. Acosta and S. F, “Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 207, no. 2, pp. 107-123, 2003.
- [19] T. Solberg, J. DeMarco, I. Chetty, A. Mesa, C. Cagnon, A. Li, K. Mather, P. Medin, A. Arellano and J. Smathers, “A review of radiation dosimetry applications using the MCNP Monte Carlo code,”

Radiochimica Acta, vol. 89, no. 4-5, pp. 337-355, 2001.

- [20] G. Iaccarino, L. Strigari, M. D'Andrea, L. Bellesi, G. Felici, A. Ciccotelli, M. Benassi and A. Soriani, "Institute of Physics and Engineering in Medicine, Monte Carlo simulation of electron beams generated by a 12 MeV dedicated mobile IORT accelerator," *Physics in Medicine & Biology*, vol. 56, no. 14, p. 4579, 2011.
- [21] ICRU 90, Key Data for Ionizing Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications (ICRU Report vol 90), Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements, 2016.
- [22] J. Sempau, A. Sánchez-Reyes, F. Salvat, H. Oulad ben Tahar, S. B. Jiang and J. M. Fernández-Varea, "Monte Carlo simulation of electron beams from an accelerator head using PENELOPE," *Physics in Medicine & Biology*, vol. 46, no. 4, p. 1163, 2001.
- [23] I. Méndez, J. Rovira-Escutia and B. Casar, "A protocol for accurate radiochromic film dosimetry using Radiochromic.com.," *Radiol. Oncol*, vol. 55, pp. 369-78, 2021.
- [24] I. Méndez, A. Polšak, R. Hudej and B. Casar, "The multigaussian method: a new approach to mitigating spatial heterogeneities with multichannel radiochromic film dosimetry.," *Phys Med Biol*, vol. 63, p. 175013, 2018.
- [25] R. Garcia-Gil, S. Casans, A. Edith Navarro, A.-J. García-Sánchez, J. J. Rovira-Escutia, D. Garcia-Costa, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, J. Pérez-Calatayud and E. Sanchis, "Embedded bleeding detector into a PMMA applicator for electron intraoperative radiotherapy," *Physica Medica*, vol. 94, pp. 35-42, 2022.
- [26] H. Niu, W. Hsi, J. Chu, M. Kirk and E. Kouwenhoven, "Dosimetric characteristics of the Leipzig surface applicators used in the high dose rate brachy radiotherapy," *Medical Physics*, vol. 31, pp. 3372-7, 2004.
- [27] J. Pérez-Calatayud, D. Granero, F. Ballester, V. Puchades, E. Casal, A. Soriano and V. Crispín, "A dosimetric study of Leipzig applicators.," *Int J Radiat Oncol Biol Phys*, vol. 62, no. 2, pp. 579-84, 2005.
- [28] R. W. Janssen, B. A. Faddegon and W. J. F. Dries, "Prototyping a large field size IORT applicator for a mobile linear accelerator," *Physics in Medicine and Biology*, vol. 53, pp. 2089-2102, 2008.

II.3 Generació de PSFs per a planificació amb LinAcs.

Referència: S. Oliver, B. Juste, R. Miró, G. Verdú: **A methodology for computationally generating phase space files for Monte Carlo simulations applied to treatment plans for Medical Linear Accelerators.**

Article en revisió en la revista: *Radiation Physics and Chemistry*

II.3.1 Introducció i motivació.

Tal i com s'ha explicat en la Secció I.1, el mètode MC s'empra en planificació de radioteràpia amb LinAcs des de la dècada dels 80 [145]. Actualment, algunes de les modalitats estàndard de tractament de radioteràpia són la tècnica externa de conformació tridimensional (3DCRT), i la teràpia de radiació modulada en intensitat (IMRT) [146, 147, 148]. Aquestes tècniques, milloren la capacitat de donar forma al feix de radiació per tal d'ajustar-se a la forma irregular de l'objectiu a tractar. A més, donat que la secció de l'objectiu depèn de l'angle d'incidència, el feix s'haurà d'adaptar en cada pas angular del tractament. Així, s'aconsegueix proporcionar dosis elevades, mentre que es redueix significativament l'exposició a la radiació d'altres teixits sans circumdants. En aquest punt, entren en joc les làmines del MLC, les quals són essencials per aconseguir la conformació desitjada del feix, tenint aleshores un paper crucial en l'optimització de la precisió del tractament.

Pel que fa a la planificació d'aquest tipus de tractaments, donat que la simulació del capçal de l'accelerador és computacionalment costosa, serà necessari emprar PSFs per optimitzar les simulacions, com s'ha discutit a la Secció I.3.4.3. No obstant, donada la variabilitat de la configuració del MLC durant el tractament, es requeriria un PSF per a caracteritzar cada possible configuració a emprar, podent descriure, així, l'accelerador. Malauradament, generar els PSF per a totes les possibles combinacions de les posicions de les làmines d'un MLC requeriria, no sols un enorme temps de còmput, sinó, a més, una gran quantitat d'emmagatzematge per guardar els fitxers produïts.

Pels motius plantejats, la planificació d'aquest tipus de tractaments, ja siga per a investigació o ús clínic, es veuria beneficiada si existira una eina capaç de generar directament els PSF requerits per a un tractament específic. Una eina capaç de realitzar aquest càlcul de forma ràpida esdevindria un avantatge per l'ús de simulacions MC en planificació de tractaments amb LinAcs. Més encara, per a que el desenvolupament siga transparent a l'usuari i pugui emprar-se amb qualsevol codi de simulació MC, és convenient que els PSF es generen en el format estàndard de la IAEA, com s'ha vist a la Secció I.3.4.3.

II.3.2 Objectius de l'estudi.

Amb la intenció d'oferir una solució al problema esmenat, l'objectiu d'aquest treball consisteix en presentar una metodologia per a la generació computacional de PSFs amb un feix conformat segons les posicions de les làmines del MLC introduïdes per l'usuari. Tot i que l'objectiu del treball s'aborda per a MCNP6, emprant les eines desenvolupades al primer treball d'aquesta tesi, els PSFs generats poden traduir-se al format estàndard de la IAEA a partir dels programes desenvolupats a la Secció II.1, i emprar-se amb qualsevol altre codi que implemente el suport corresponent.

II.3.3 Materials i mètodes.

II.3.3.1 Base de dades de funcions de probabilitats precalculades.

Per tal de poder generar els PSFs a l'eixida del capçal del LinAc amb la forma desitjada, és necessari conèixer les funcions de probabilitat de cadascuna de les variables emmagatzemades a dit fitxer. Tota aquesta informació, recollida a partir de simulacions, es guarda en una base de dades, la generació de la qual, s'explicarà al llarg d'aquesta secció.

La metodologia descrita, s'ha aplicat per a un model específic d'accelerador, un Varian Clinac 2100 C amb un MLC compostat per 120 làmines, que es mostra en la Figura II.6. A més, s'ha escollit per desenvolupar l'eina una energia de feix concreta, feix de fotons de 6 MeV, l'espectre del qual s'ha extret de [149] i una mida de camp de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ per a una $SSD = 100 \text{ cm}$. Amb aquesta configuració, el MLC es configurarà per conformar el feix amb una mida màxima del camp predefinit pels col·limadors primaris. El motiu d'escollir el LinAc esmenat, recau en que, ja es disposava de la seua geometria completa, els materials es coneixien amb detall, i ja s'havia validat prèviament en un maniquí d'aigua [131]. Tot i això, el mètode és extensible per a qualsevol combinació d'energia, model d'accelerador i mida de camp.



Figura II.6: Geometria completa de l'accelerador Varian Clinac 2100 C construït a partir dels plànols cedits per la companyia Varian per a propòsits d'investigació.

El primer pas per poder generar la base de dades descrita, a partir de la geometria construïda, és generar un PSF inicial, anomenat PSF_i , situat a després dels col·limadors secundaris, emprant el codi MCNP6.1, tal i com es mostra en la Figura II.7. Per dur a terme esta simulació inicial, es va establir el 'mode P E' al fitxer d'entrada, per tal de fer el seguiment de tots els fotons primaris, així com els fotons i electrons secundaris generats. Com a primera aproximació, s'ha considerat que els col·limadors secundaris romanen en la posició de la làmina més oberta del MLC, constant per al cas d'estudi d'aquest treball. Així doncs, el PSF_i es genera una única vegada per a cada mida del camp de radiació i es reutilitza com a font per a realitzar les successives simulacions necessàries per a generar la base de dades.

El procés de generació d'aquesta base de dades deriva de la forma que es descriurà a continuació. Tal i com es mostra en la Figura II.8, just sot al PSF_i es troba el MLC, amb una única làmina oberta en una posició fixa, generant una apertura de 5 cm a una $SSD = 100$

cm, mentre les altres romanen tancades. Amb aquesta configuració, es realitza la simulació corresponent amb el feix travessant el MLC. Aleshores, el camp resultant es recull en un nou PSF, situada just a la sortida del MLC, el qual s'anomena PSF_k , on el subíndex k denota el nombre de làmina, ja que aquest procés es repeteix per a cada làmina del MLC. Descriu aquest procés, es configuren diferents geometries i , en cadascuna d'elles, una única làmina k està oberta, a una apertura concreta, sent el cas completament obert el que genera un camp de 5 cm a una $SSD = 100$ cm. Amb cadascuna de les geometries, es realitza una simulació en la que el PSF_i s'empra com a font. Cal assenyalar que el MLC es simètric respecte del seu centre, i que aprofitant aquesta simetria, és possible reduir el nombre de simulacions, ja que només es simula cada làmina k , per a cadascuna de les seues possibles posicions, que es trobe dins del sector anomenat sector de referència.

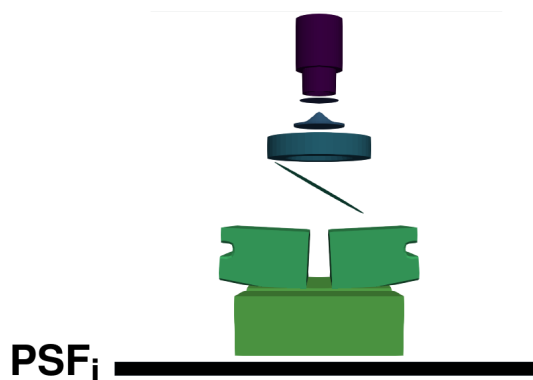


Figura II.7: Esquema del Varian Clinac 2100 C amb la posició on es genera el PSF inicial (PSF_i).

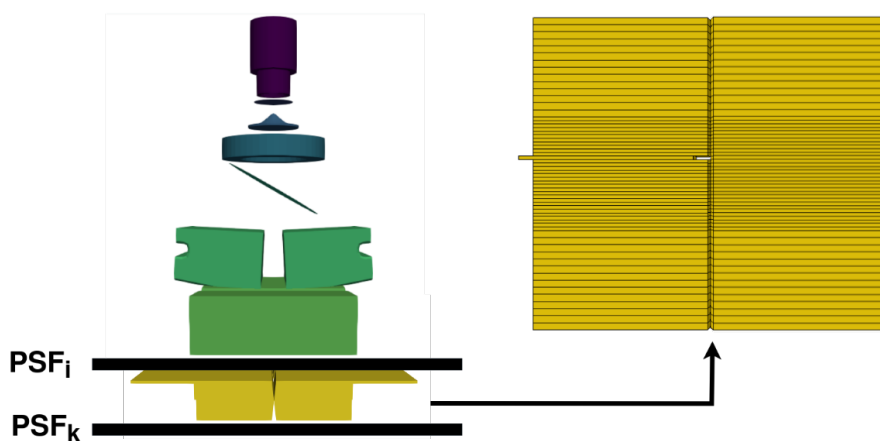


Figura II.8: Esquema del Varian Clinac 2100 C amb la posició on es genera el PSF inicial (PSF_i), el MLC i on es genera el PSF per a cada posició de cada una de les làmines (PSF_k).

Per poder generar un feix de mida 10×10 cm² a una $SSD = 100$ cm, el MLC del model de LinAc escollit, ha de tindre obertes un total de 24 làmines. Aprofitant la seua simetria tal i com s'ha explicat, únicament s'hauran de realitzar les simulacions corresponents a les diferents possibles posicions de les làmines del sector de referència, en negre en la Figura II.9. El sector de referència, comprèn 6 làmines, és a dir, $k = 6$, un quart del nombre total de làmines necessàries per generar el camp descrit. La informació de les làmines corresponents

als altres sectors, es pot obtenir mitjançant translacions i rotacions adequades de la posició i direcció de les partícules emmagatzemades a cada PSF_k del sector de referència.

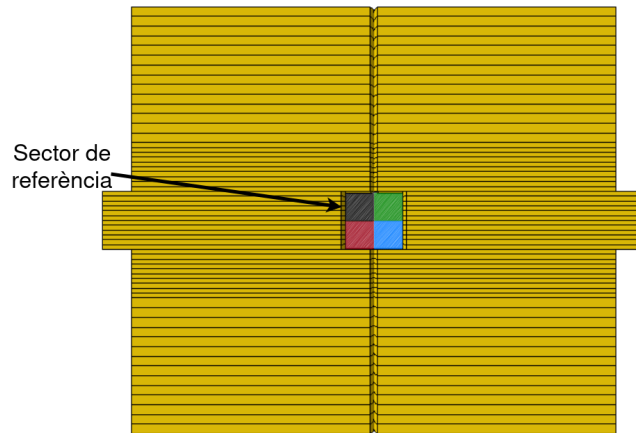


Figura II.9: Esquema dels sectors en els quals es divideix el camp de radiació al MLC, mostrant en color negre el sector anomenat de referència. El camp que genera el col·limador de la figura correspon a una mida de camp de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a una $SSD = 100 \text{ cm}$

Es recull aleshores el PSF per a cada combinació de cada làmina i apertura, fent els desplaçaments de les làmines cada 5 mm. A partir dels fitxers, s'ha de conèixer l'energia i direcció de cadascuna de les partícules segons la posició on es troben. Amb aquesta informació és amb la qual es generarà la base de dades de funcions de probabilitat de les partícules del feix. Per tal de discretitzar les variables d'estat espacialment, les simulacions es dissenyen de tal forma que s'inclou un registre de fluència, FMESH4, just a la superfície corresponent al PSF_k . El registre s'especifica amb bins d' 1 mm^2 cobrint tota la superfície. Amb la informació recollida amb el FMESH4, es podran agrupar les característiques de les partícules (energia, i direcció entre altres variables d'estat emmagatzemades al PSF) en funció de la posició de cada partícula.

Així doncs, per a cada simulació, amb una làmina k oberta en una posició concreta i la resta tancades, s'obté un registre de fluència binejat espacialment, i un PSF que conté les variables d'estat de cada partícula quan arriba a dita superfície. Es generen aleshores, un conjunt d'eines i programes que permeten, per a cada bin d' 1 mm^2 definit al registre, recórrer el PSF llegint la informació de totes les partícules que es troben en eixe interval espacial. Dita informació s'emmagatzema separatament i per tal de poder calcular les funcions de probabilitat, en cada bin espacial, per a l'energia (E), la posició de la partícula dins del bin (X, Y) i la direcció de la mateixa a partir dels cosinus de l'angle que forma amb els eixos X , Y respectivament (U, V). Cal assenyalar que, com la direcció del feix va en l'eix Z , la direcció Z roman constant per a totes les partícules, ja que el PSF_k s'adquireix a una superfície constant. D'altra banda, el cosinus de l'angle que la direcció de la partícula forma amb l'eix Z denotat per W , es calcula internament durant la simulació, tenint en compte que la direcció de la partícula es troba normalitzada a la unitat.

Els resultats d'aquests conjunts de simulacions que es guardaran en la base de dades, consistiran finalment en, d'una part, un histograma de probabilitat de la distribució d'energia, discretitzat en 100 intervals energètics cobrint tot l'espectre del feix, per a cada bin espacial. D'altra part, els mapes de probabilitat per a les variables de posició i direcció, ja que ambdues parelles de paràmetres estan correlacionades. El procés del càlcul de les

funcions de probabilitat i l'emmagatzematge d'aquesta informació en un fitxer independent generat per a cadascun dels bins espacials es denomina *mapejat*.

Una vegada s'ha procedit amb el mapejat de totes les làmines del sector de referència en cadascuna de les possibles posicions d'apertura, es crea la base de dades amb les funcions de probabilitat de les variables d'estat a cada bin espacial del feix.

II.3.3.2 Generació i validació dels espais de fase computacionals. Exemples senzills.

Després de la creació de la base de dades, es desenvolupa un programa que, llegint aquesta informació, siga capaç de generar un nou PSF. Aquest, es genera a l'altura corresponent just a l'eixida de MLC del LinAc i consistirà en el feix conformat segons la demanda de l'usuari. El programa esmenat, llegeix el fitxer d'entrada de l'usuari, que conté un llistat de posicions de làmines per a cadascun dels sectors del MLC i, recuperant la informació necessària de la base de dades per a cada làmina i la seua posició corresponent, genera una partícula a la qual li atribuirà les variables d'estat segons les funcions de probabilitat del bin espacial. Així, per a un total de partícules establertes també per l'usuari, es genera un PSF conformat, en format MCNP6, bé per a versió 1 o bé per a versió 2. Aprofitant l'eina de conversió entre formats MCNP6 - IAEA prèviament desenvolupada i validada en aquesta tesi, treball 1, els PSFs resultants obtinguts, es podran convertir i ser emprats per altres codis.

Una vegada s'ha establert la metodologia per a la generació del PSF, es procedeix amb la validació de la mateixa. En un primer pas, la validació es realitza amb dos exemples senzills, que es descriuran amb detall a continuació. Un correspon amb la generació d'un PSF per a un camp de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a una SSD = 100 cm, mentre que l'altre correspon a un camp en forma de rombe a la mateixa SSD, circumscrit en un camp quadrat de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, seguint les recomanacions de la IAEA-TECDOC-1583 [150].

Per al procés de validació, s'han realitzat diferents simulacions, obtenint dades de referència i generades per dur a terme les corresponents comparacions. La Figura II.10 mostra esquemàticament la configuració d'aquestes simulacions.

D'una part, l'anomenada simulació de referència, consisteix en emprar el PSF_i, com a font per a la simulació del feix travessant la geometria del MLC, configurat per generar el camp amb la forma especificada. Per als casos que ens ocupen, aquest camp serà o bé de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ o en forma de rombe. Una vegada es fa passar el feix a través del MLC, es genera un nou PSF, anomenat de referència (PSF_r), en el qual es considera també un registre FMESH4 amb una mida de bin de 1 mm^2 al llarg de la grandària de tot el camp de radiació.

D'altra part, fent ús de l'eina de descrita, es genera un PSF (PSF_g) just després del MLC, de tal manera que aquest i el PSF_r es troben a la mateixa altura. També en aquest cas, es col·loca un registre FMESH4 per conèixer com ha estat la distribució de les partícules en el camp de radiació. Cal assenyalar que el PSF generat, es va escriure emprant el mateix nombre de partícules primàries i enregistrant les mateixes trajectòries que s'havien registrat al PSF de referència, per tal de poder comparar-les adientment.

A partir d'aquests PSFs, es realitzen dues simulacions, cadascuna emprant un d'ells com a font i amb el mateix nombre de partícules a simular, en les quals el feix es dirigeix cap a un maniquí d'aigua de $50 \times 50 \times 50 \text{ cm}^3$ col·locat a una SSD = 100 cm. En ambdues simulacions es configuren els mateixos registres, TMesh Type 3 per obtenir els perfils laterals de dosi a diferents profunditats del maniquí, amb una mida de vòxel d' 1 mm^3 .

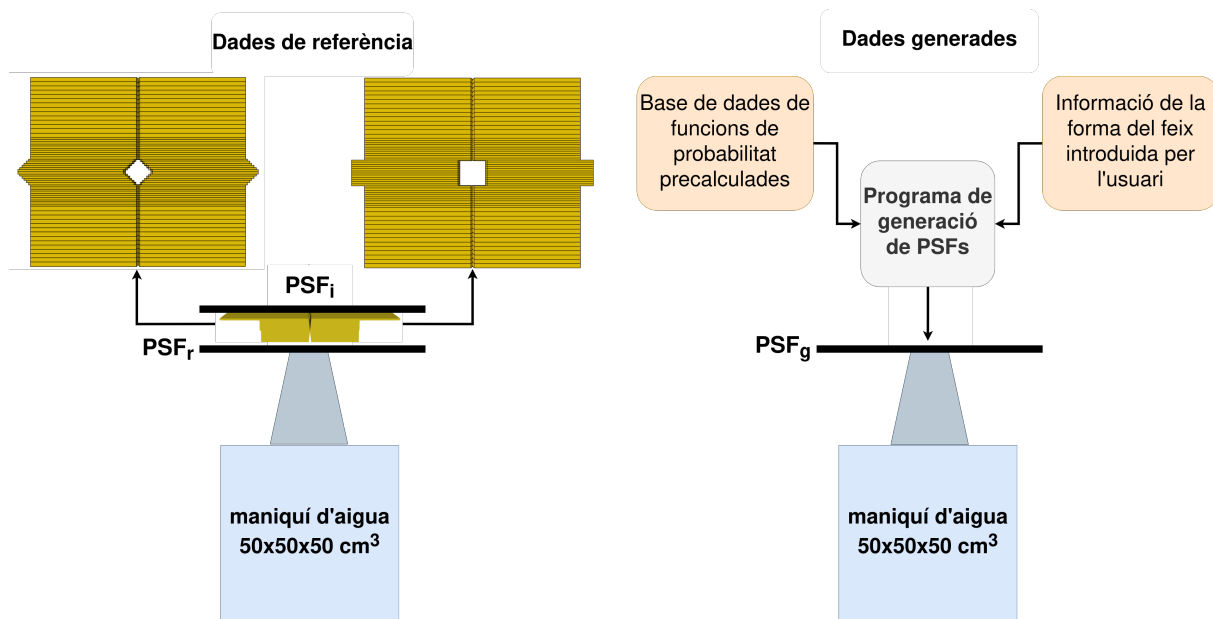


Figura II.10: Representació esquemàtica del procés d'obtenció d'ambdós conjunts de dades per a al validació del programa desenvolupat. D'una part les dades de referència i d'altra part les dades generades computacionalment.

II.3.3.3 Exemple complex: tractament d'irradiació de pròstata.

Per tal d'avaluar la metodologia descrita en un escenari comparable a un cas clínic, s'ha triat un cas de tractament d'irradiació de pròstata emprant el maniquí computacional MRCP masculí. Aquest maniquí s'ha escollit degut a la seua definició detallada de tots els òrgans i teixits radiosensibles, tal i com s'ha descrit en la secció I.4.2.1, i aprofitant que la ICRP145 el proporciona directament en format MCNP6. En la present secció, s'explicarà aleshores, com s'han emprat els PSF_r i PSF_g per simular el pla del tractament descrit amb tres posicions equidistants del braç de l'accelerador.

Els passos duts a terme per seguir el procediment de generació de PSFs i el seu ús en el cas clínic descrit, així com la validació del procediment, s'expliquen a continuació:

- S'empren 3 feixos equiespaiats 60° entre ells per cobrir la pròstata del maniquí.
- S'obtenen dos conjunts de feixos d'irradiació. D'una part el primer conjunt s'obté emprant el PSF de referència registrat just a l'eixida del capçal del Varian ClinAc, col·locant segons corresponga les làmines en la geometria del MLC, PSF de referència (PSF_r). L'altre conjunt, s'obté emprant el programa desenvolupat, introduint-li la posició de cadascuna de les làmines, obtenint el PSF generat (PSF_g).
- Per a cada angle d'irradiació, de cadascun dels conjunts de feixos descrits al punt anterior, es realitza una simulació. En aquestes simulacions, es recull la distribució de dosi sobre el maniquí, així com la dosi absorbida en els òrgans d'interès. Amb dits resultats, s'obtenen les distribucions de dosi final i les dosis corresponents al tractament complet.

Finalment, ambdós tractaments complets es comparen per validar la metodologia dissenyada. Tot i que aquest exemple de tractament mostra un pla amb tres feixos conformats,

es pot ampliar en la pràctica clínica adaptant-se a les posicions del braç de l'accelerador necessàries segons l'escenari clínic del pacient.

La Taula II.5, recull de forma resumida el paràmetres de simulació per als diferents casos descrits en les seccions anteriors.

Taula II.5: Resum de les principals característiques de les simulacions Monte Carlo realitzades en aquest treball.

Ítem	Descripció	Referències
Codi	MCNP6.1, MCNP6.2	[89, 98, 99]
Validació	Prèviament validat	[151, 131]
Execució	Validació exemples senzills MCNP6.2 AMD EPYC 7282: Camp quadrat PSF 38376420 partícules, 136 hores de CPU (PSF referència) i 43.2 hores de CPU (PSF generat). Camp rombe PSF 47435447 partícules, 86.4 hores de CPU (PSF referència) i 33.6 hores de CPU (PSF generat) Validació cas pròstata MCNP6.2 AMD EPYC 7282: PSF 85766145 partícules, 78.2 hores de CPU (PSF referència) i 29.7 hores de CPU (PSF generat)	
Descripció de la font	PSF de referència i generat a l'eixida del MLC d'un Varian Clinac 600C. Feix de fotons de 6 MV. Mida del camp $10 \times 10 \text{ cm}^2$, rombe o conformat, SSD = 100 cm.	[149]
Seccions eficaces	MCNP: MCPLIB84, EL03	[94, 95, 96, 97]
Paràmetres del transport	$E_{tall}^e = 100 \text{ KeV}$, $E_{tall}^f = 10 \text{ KeV}$ en tots els materials.	
Tècniques de reducció de variància	Divisió de partícules en les fonts de PSF.	[75, 98, 99], [74, 91]
Quantitats registrades	Dosi absorbida en el maniquí d'aigua i maniquí MRCP.	
Incertesa estadística	$\leq 3\%$ ($k=2$)	
Post-processat	Cap	

II.3.4 Resultats.

II.3.4.1 Validació del PSF generat.

Per tal de validar la metodologia descrita, es comparen els PSFs generats amb els equivalents considerats de referència per als dos exemples senzills, el del camp quadrat i el del camp en forma de rombe.

II.3.4.1.1 Validació del camp quadrat de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a una $\text{SSD} = 100 \text{ cm}$.

Primerament, la imatge II.11 mostra la distribució espacial de les partícules just a l'eixida del MLC de l'accelerador per al PSF generat amb el programa desenvolupat.

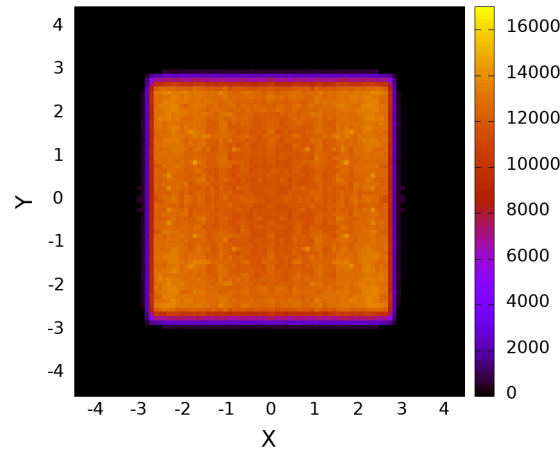


Figura II.11: Distribució espacial de les partícules just a l'eixida del MLC de l'accelerador en el PSF generat.

La comparació dels espectres energètics dels PSFs generat i l'equivalent de referència, es mostra en la Figura II.12, on a més, es presenta la diferència relativa entre ells. L'anàlisi de les diferències resulta en que un total del 84% dels intervals energètics difereixen menys d'un $\pm 2\%$, i que el 98% dels intervals, mostren diferències menors del $\pm 5\%$. Cal assenyalar que les diferències relatives més significatives, es donen per a energies amb menor contribució en l'espectre, és a dir, per sota dels 0.5 MeV o per sobre dels 5.5 MeV.

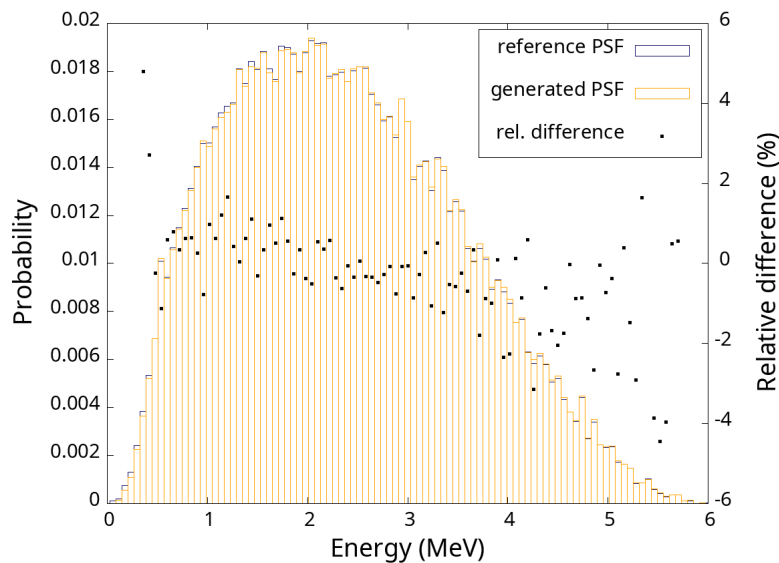
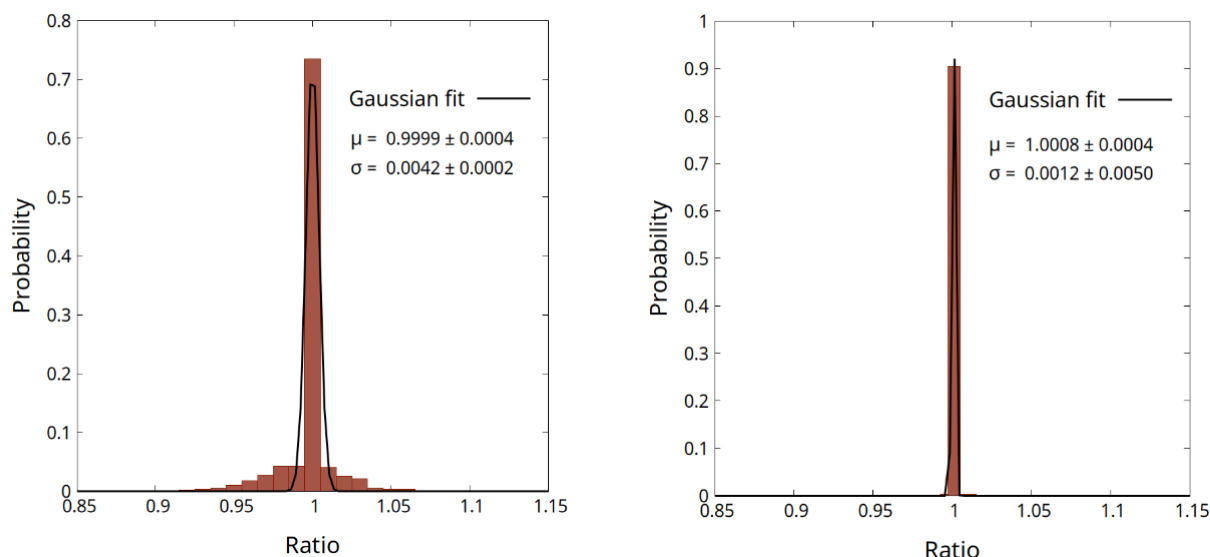


Figura II.12: Comparació dels espectres energètics per al camp quadrat de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ i $\text{SSD} = 100 \text{ cm}$, obtinguts de l'anàlisi de les variables d'estat emmagatzemades tant en el PSF de referència com en el generat.

A més, una comparació entre els mapes de posició de les partícules (variables d'estat

X,Y del PSF) s'ha dut a terme entre el PSF generat i el de referència. Aquesta mateixa comparació s'ha realitzat també entre els mapes de direcció (variables d'estat U, V del PSF). A les Figures II.13, es mostra la distribució dels quocients d'aquestes magnituds. Com es pot observar, en ambdós casos, els histogrammes s'ajusten a una funció Gaussiana. En el cas de la comparació del mapa de posicions X, Y aquest ajust resulta $\mu = 0.9999 \pm 0.0004$ i $\sigma = 0.0042 \pm 0.0002$. I per al cas del mapa de direccions U, V l'ajust mostra $\mu = 1.0008 \pm 0.0004$ i $\sigma = 0.0012 \pm 0.0005$.



(a) Quocient entre els mapes de posicions X,Y de les PSF generat i de referència.

(b) Quocient entre els mapes de direccions U,V de les PSF generat i de referència.

Figura II.13: Distribució dels quocients entre els mapes de posicions (a) i direccions (b), dels PSF generats i de referència, per al camp $10 \times 0 \text{ cm}^2$.

A més de les comparacions de les variables d'estat dels PSFs, s'han analitzat i comparat, els resultats de les simulacions realitzades emprant aquests PSFs com a feix d'irradiació en maniquí d'aigua. Els perfils laterals de dosi absorbida d'ambdues simulacions, s'han comparat vòxel a vòxel, a diferents profunditats, $z=1.5, 5, 10$ i 20 cm des de la superfície del maniquí. A la Figura II.14, es mostren els perfils de dosi esmenats d'ambdues simulacions, al llarg de l'eix x per a $y = 0 \text{ cm}$. Noteu, que per a la geometria del LinAc, l'eix x correspon amb l'eix de moviment de les làmines del MLC.

Els valors obtinguts de la simulació amb el PSF generat, es mostren en negre per a totes les profunditats, i els símbols que s'han representat són: quadrats per a $z = 1.5 \text{ cm}$, triangles per a $z = 5 \text{ cm}$, rombes per a $z = 10 \text{ cm}$ i triangles invertits per a $z = 20 \text{ cm}$. Els mateixos símbols s'han escollit per representar els resultats del PSF de referència, però en aquest cas, amb un color diferent per a cada profunditat, tal i com marca la llegenda de la imatge.

Tots els resultats es representen amb barres d'error corresponents a 2σ de la incertesa estadística inherent als càlculs de MC, incertesa tipus A, mentre que les línies representen el límit per a $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

Els resultats són, aleshores, estadísticament compatibles entre els dos PSFs per a les diferents profunditat estudiades, i a més, a totes elles, almenys el 90% dels vòxels es troben dins de la línia marcada corresponent al $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència i el 100% dins de la línia del $\pm 5\%$. Analitzant en detall cadascuna de les profunditats, s'obté el que es mostra a la Taula II.6.

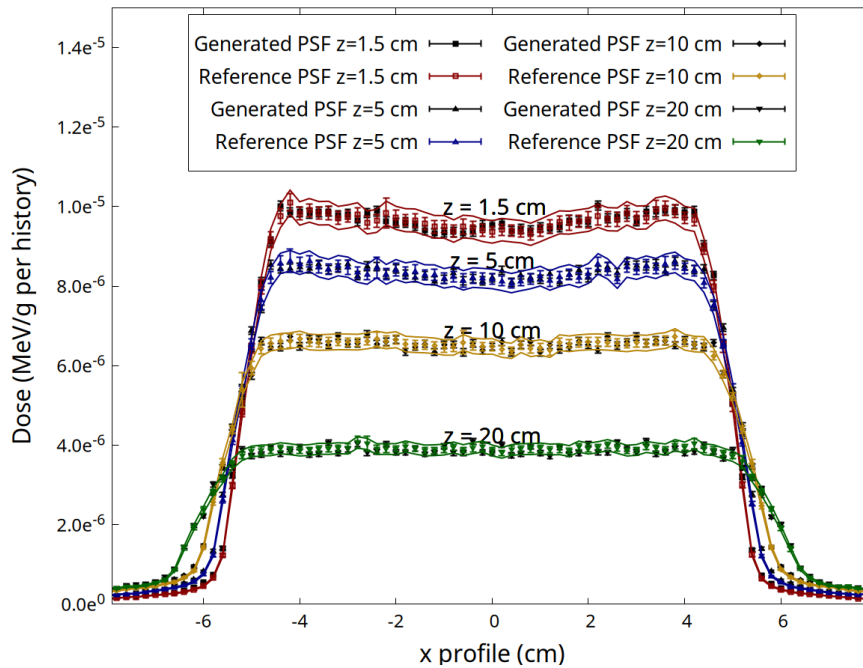


Figura II.14: Perfils de dosi laterals en l'eix x i $y = 0$ cm, per a diferents profunditats sota la superfície del maniquí d'aigua. Es mostren els resultats per als PSFs de referència i generat. Les barres d'error mostren la incertesa estadística a 2σ i les línies mostren el $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

Profunditat	vòxels dins del $\pm 2\%$	vòxels dins del $\pm 3\%$	vòxels dins del $\pm 5\%$
$z = 1.5$ cm	96%	98%	100 %
$z = 5$ cm	94%	96%	100 %
$z = 10$ cm	86%	93%	100 %
$z = 20$ cm	85%	90%	100 %

Taula II.6: Resultats per als perfils de dosi en l'eix x , $y = 0$ cm. Per a cada profunditat sota la superfície del maniquí, es mostra el percentatge de vòxels de la simulació amb PSF generat que tenen valors de dosi dins dels intervals $\pm 2\%$, $\pm 3\%$ i $\pm 5\%$, respecte als valors de dosi obtinguts amb la simulació de referència.

La mateixa comparació, s'ha realitzat també per a l'eix y en $x = 0$ cm, la qual es mostra en la Figura II.15, amb un comportament similar al cas anteriorment exposat. S'ha realitzant l'anàlisi corresponent a la comparació dels valors de dosi obtinguts de les simulacions amb PSF generat, respecte al de referència, els quals es mostren en la Taula II.7.

Una validació més s'ha dut a terme comparant les PDDs obtingudes, d'un part, per simulació amb el PSF generat i, d'altra, mitjançant mesures experimentals, proporcionades per l'Hospital Universitari i Politènic La Fe de València. Dites mesures corresponen a una PDD a l'eixida d'un Varian Clinac emetent un feix de 6 MeV amb una mida de camp de 10×10 cm² a una SSD = 100 cm, es van realitzar una càmera d'ionització PTW Thimble. El resultat de la comparació es presenta en la Figura II.16.

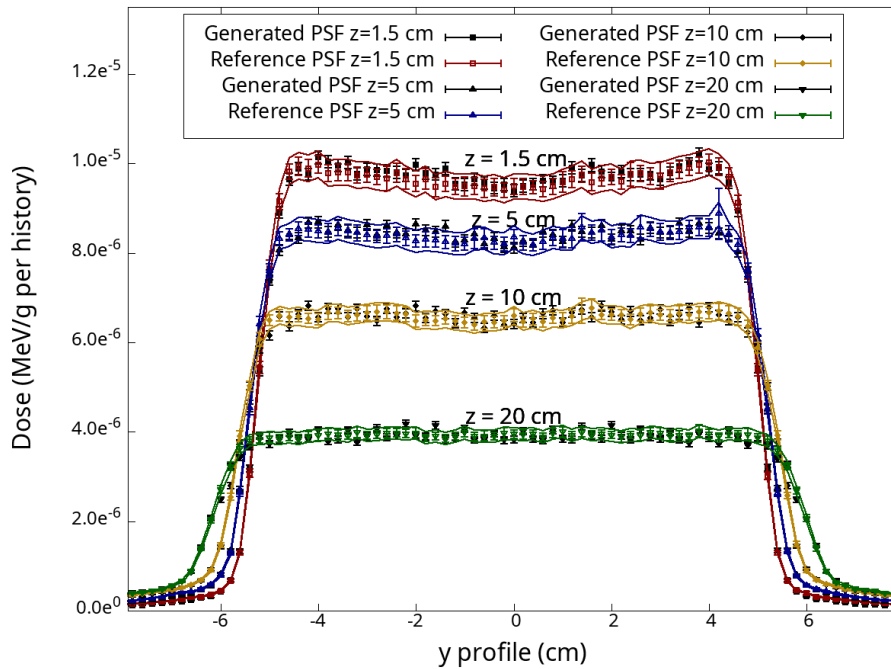


Figura II.15: Perfils de dosi laterals en l'eix y i $x = 0$ cm, per a diferents profunditats sota la superfície del maniquí d'aigua. Es mostren els resultats per als PSFs de referència i generat. Les barres d'error mostren la incertesa estadística a 2σ i les línies mostren el $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

Profunditat	vòxels dins del $\pm 2\%$	vòxels dins del $\pm 3\%$	vòxels dins del $\pm 5\%$
$z = 1.5$ cm	92%	95%	100 %
$z = 5$ cm	89%	96%	100 %
$z = 10$ cm	85%	94%	100 %
$z = 20$ cm	85%	94%	100 %

Taula II.7: Resultats per als perfils de dosi en l'eix y , $x = 0$ cm. Per a cada profunditat sota la superfície del maniquí, es mostra el percentatge de vòxels de la simulació amb PSF generat que tenen valors de dosi dins dels intervals $\pm 2\%$, $\pm 3\%$ i $\pm 5\%$, respecte als valors de dosi obtinguts amb la simulació de referència.

II.3.4.1.2 Validació del camp en forma de rombe circumscribit en un camp quadrat màxim de 10×10 cm² a una SSD = 100 cm.

El segon cas per a validació del programa desenvolupat, consisteix en la generació d'un PSF computacional conformat de tal forma que genere un rombe a una SSD = 100 cm, circumscribit en un camp quadrat màxim de 10×10 cm² a dita distància. El mateix anàlisi que s'ha dut a terme en la secció anterior, s'ha realitzat per a aquest cas. La Figura II.17 mostra la comparació entre els espectres energètics del PSF de referència i generat per a aquest camp, la qual mostra que el 78% dels intervals d'energia difereixen en menys d'un $\pm 2\%$, i el 93% presenten diferències inferiors al $\pm 5\%$. De la mateixa manera que en el cas anterior, les diferències relatives més significatives es donen per a les energies amb una menor contribució a l'espectre, és a dir, per a intervals per sota de 0.5 MeV o per sobre de 5.5 MeV.

D'una part, la Figura II.18 mostra la distribució de partícules en el PSF generat, on

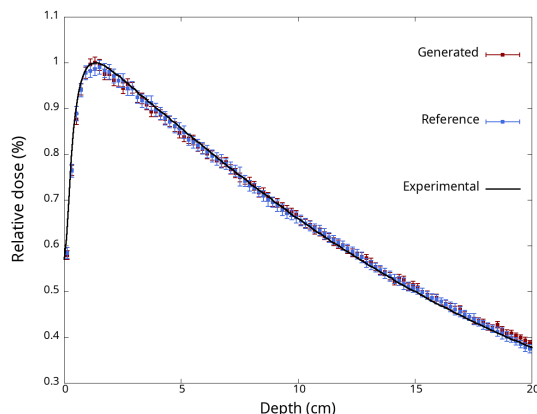


Figura II.16: Comparació de les PDDs obtingudes a partir de la simulació amb el PSF generat i de referència i la PDD mesurada experimentalment. Les dades experimentals han estat proporcionades per l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe de València.

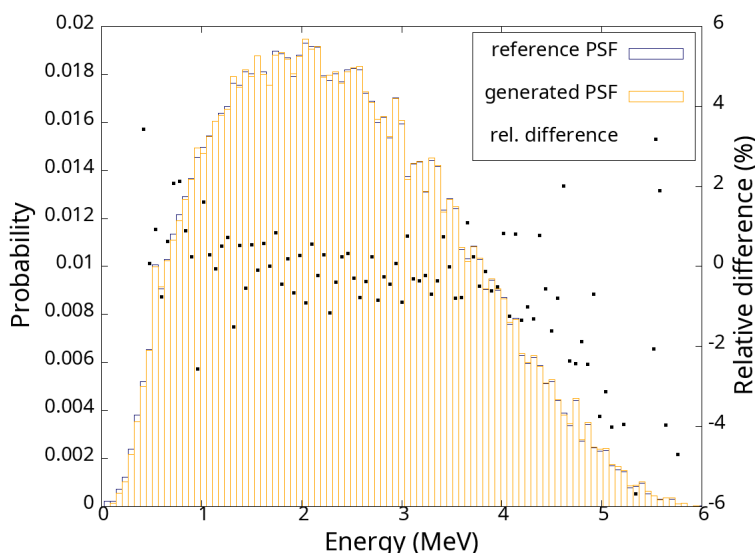


Figura II.17: Comparació dels espectres energètics per al camp en forma de rombe circumscrit en un quadrat de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a una SSD = 100 cm, obtinguts de l'anàlisi de les variables d'estat emmagatzemades tant en el PSF de referència com en el generat.

s'observa la forma de rombe.

D'altra part, la Figura II.19 mostra el quocient, entre els mapes de posició de les partícules (variables d'estat X,Y del PSF) del PSF generat i el de referència. Aquesta mateixa comparació s'ha realitzat també entre els mapes de direcció de les partícules (variables d'estat U, V del PSF), ajustant-se els histogrames en ambdós comparacions a una funció Gaussiana, resultant per al mapa X,Y $\mu = 1.0002 \pm 0.0004$ i $\sigma = 0.0043 \pm 0.0004$, i per al mapa U,V $\mu = 1.0007 \pm 0.0007$ i $\sigma = 0.0016 \pm 0.0005$.

Així mateix, per al cas en forma de rombe, es comparen els perfils de dosi laterals obtinguts a diferents profunditats del maniquí d'aigua, vòxel a vòxel, entre les simulacions realitzades amb font el PSF de referència i el generat. Els resultats mostrats en les Figures II.20 i II.21, es presenten amb barres d'error corresponents a 2σ de la incertesa estadística tipus A, mentre que les línies mostren el límit per a $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

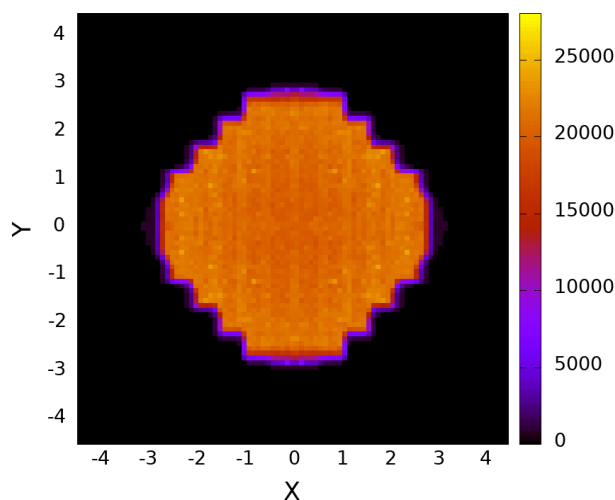
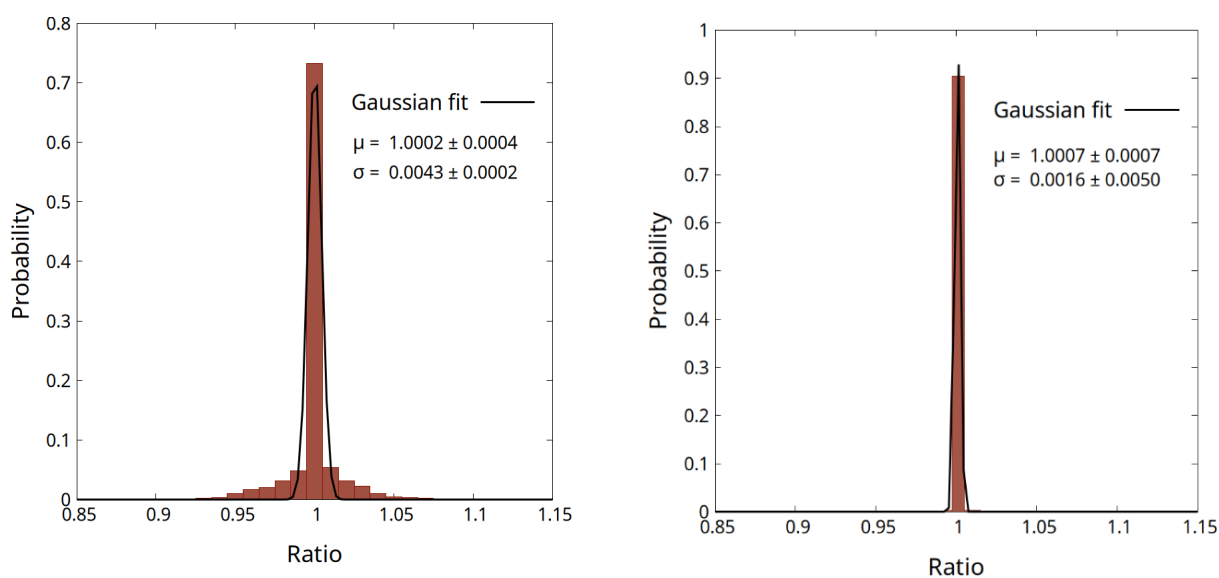


Figura II.18: Distribució espacial de les partícules just a l'eixida del MLC de l'accelerador en el PSF generat.



(a) Quocient entre els mapes de posicions X,Y de les PSF generada i de referència.

(b) Quocient entre els mapes de direccions U,V de les PSF generada i de referència.

Figura II.19: Distribució dels quocients entre els mapes de posicions (a) i direccions (b), de les PSF generada i de referència, per al camp en forma de rombe.

També en aquest cas, s'han calculat les mètriques corresponents als vòxels que es troben dins de les línies del $\pm 2\%$, $\pm 3\%$ i $\pm 5\%$ comparant els valors de les dosi de referència i les obtingudes amb la simulació emprant el PSF generat. Aquests resultats es mostren en les Taules II.8 i II.9.

Comparant els temps de simulacions per als casos descrits en aquestes seccions, resulta el següent: una reducció de temps del 68% en el cas del camp quadrat de $10 \times 20 \text{ cm}^2$, és a dir, la simulació emprant el feix de referència va trigar 8.5 hores d'execució, mentre que en la que s'emprava el feix generat computacionalment, 2.7 hores. En ambdós casos s'ha emprat un

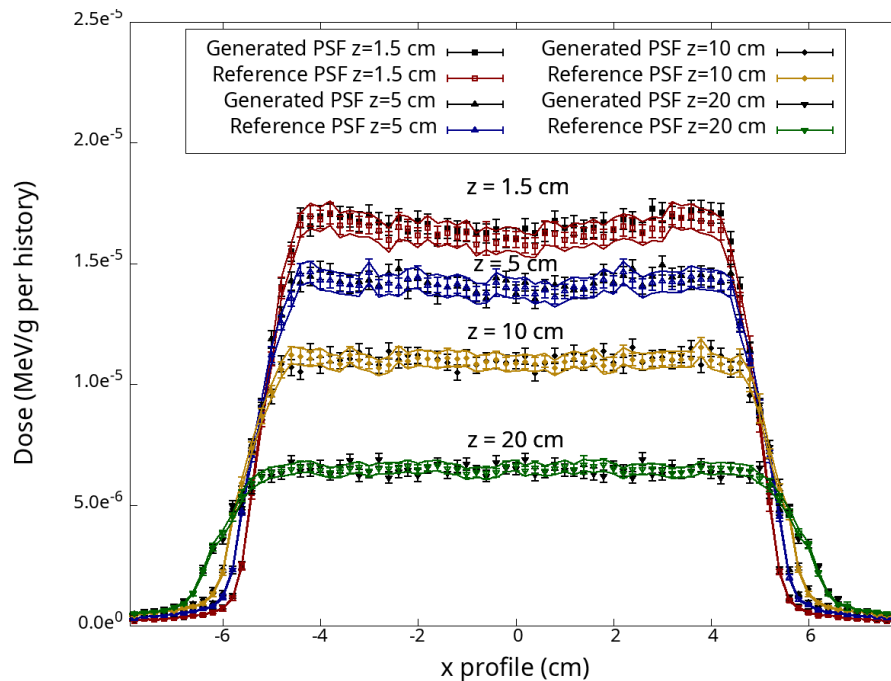


Figura II.20: Perfils de dosi laterals en l'eix x i $y = 0$ cm, per a diferents profunditats sota la superfície del maniquí d'aigua. Es mostren els resultats per als PSFs de referència i generat. Les barres d'error mostren la incertesa estadística a 2σ i les línies mostren el $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

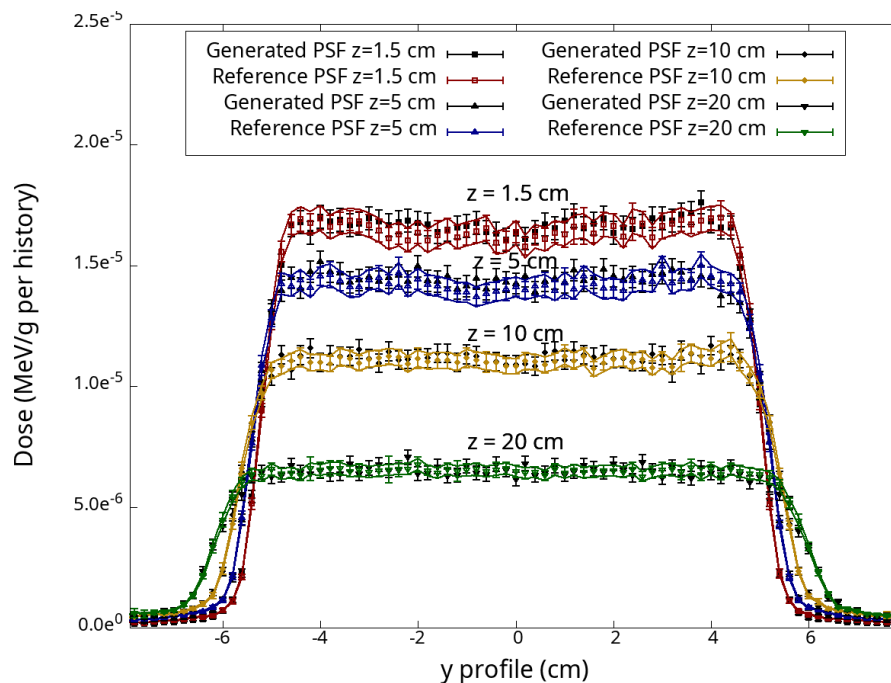


Figura II.21: Perfils de dosi laterals en l'eix y i $x = 0$ cm, per a diferents profunditats sota la superfície del maniquí d'aigua. Es mostren els resultats per als PSFs de referència i generat. Les barres d'error mostren la incertesa estadística a 2σ i les línies mostren el $\pm 3\%$ dels valors de dosi de referència.

Profunditat	vòxels dins del $\pm 2\%$	vòxels dins del $\pm 3\%$	vòxels dins del $\pm 5\%$
$z = 1.5$ cm	92%	94%	100 %
$z = 5$ cm	90%	94%	100 %
$z = 10$ cm	88%	90%	100 %
$z = 20$ cm	84%	87%	100 %

Taula II.8: Resultats per als perfils de dosi en l'eix x , $y = 0$ cm. Per a cada profunditat sota la superfície del maniquí, es mostra el percentatge de vòxels de la simulació amb PSF generat que tenen valors de dosi dins dels intervals $\pm 2\%$, $\pm 3\%$ i $\pm 5\%$, respecte als valors de dosi obtinguts amb la simulació de referència.

Profunditat	vòxels dins del $\pm 2\%$	vòxels dins del $\pm 3\%$	vòxels dins del $\pm 5\%$
$z = 1.5$ cm	90%	95%	100 %
$z = 5$ cm	89%	91%	100 %
$z = 10$ cm	89%	90%	100 %
$z = 20$ cm	85%	89%	100 %

Taula II.9: Resultats per als perfils de dosi en l'eix y , $x = 0$ cm. Per a cada profunditat sota la superfície del maniquí, es mostra el percentatge de vòxels de la simulació amb PSF generat que tenen valors de dosi dins dels intervals $\pm 2\%$, $\pm 3\%$ i $\pm 5\%$, respecte als valors de dosi obtinguts amb la simulació de referència.

processador AMD EPYC 7282 de 16 nuclis. En el cas del camp en forma de rombe, emprant les mateixes CPUs i processador, la reducció del temps entre ambdues simulacions és d'un 61%, trigant 5.4 hores per al feix de referència i 2.1 hores pel PSF generat.

II.3.4.2 Irradiació de pròstata.

En aquesta secció, es presenten els resultats del tractament de pròstata amb tres irradiacions per al model de pacient masculí adult amb el maniquí MRCP. La Figura II.22, mostra esquemàticament els tres feixos conformats que s'han emprat per irradiar el pacient. Aquests, s'han triat de tal forma que maximitzen la irradiació de la pròstata i minimitzen la dels òrgans sans adjacents. Cal assenyalar, que el propòsit d'aquest treball no és validar el procés de planificació i efectivitat del tractament, sinó validar la generació d'espais de fase a partir de les dades emmagatzemades en la base de dades de distribucions de probabilitat de les variables d'aquest fitxer. És per això que no s'analitzen les mètriques del 90% o 100% de la dosi prescrita, entre altres, típiques per avaluar l'efectivitat de la planificació, i únicament s'avalua la comparació entre resultats de la simulació de referència i de la obtinguda amb el mètode que es presenta en aquest treball.

D'altra part, la Figura II.23, mostra el conjunt de feixos generats emprant la metodologia descrita en aquest treball així com la seua distribució de dosi sobre la superfície del pacient.

A més, la distribució de dosi sobre els òrgans d'interès en aquest tipus de tractament (bufeta, recte, pelvis i pròstata), es presenta en la Figura II.24a per a la distribució obtinguda a partir de la simulació amb els espais de fase de referència, i en la Figura II.24b per a l'obtinguda amb els espais de fase generats computacionalment. Aquests resultats mostren la dosi màxima en el objectiu de tractament, preservant la resta d'òrgans. Com que les simulacions s'han configurat de tal forma que ambdós tractaments siguin equivalents, s'han

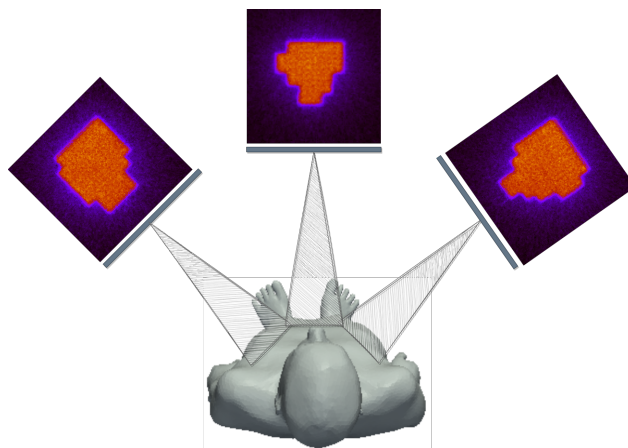


Figura II.22: Esquema que representa els tres feixos conformats emprats per al cas d'irradiació de pròstata.

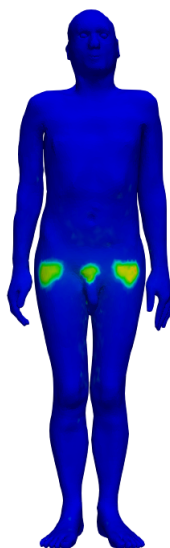


Figura II.23: Maniquí emprat com a pacient d'irradiació del tractament de pròstata on es mostra la distribució de dosi sobre la superfície del mateix deguda als tres feixos conformats emprats.

dut a terme les comparacions de dosi absorbida pels òrgans esmenats, la qual es mostra a la Taula II.10.

Finalment, s'han reportat també els temps de simulació per a cada angle d'irradiació del tractament descrit. Els resultats mostren la comparativa entre l'ús de PSFs de referència amb els generats. En aquets cas, el tractament total realitzat emprant els PSFs generats mostra una reducció de temps del 62% en comparació en el temps per a les simulacions amb els PSFs de referència. Totes les simulacions s'han dut a terme amb 10 CPUs i un processador AMD EPYC 7282 de 16 nuclis.

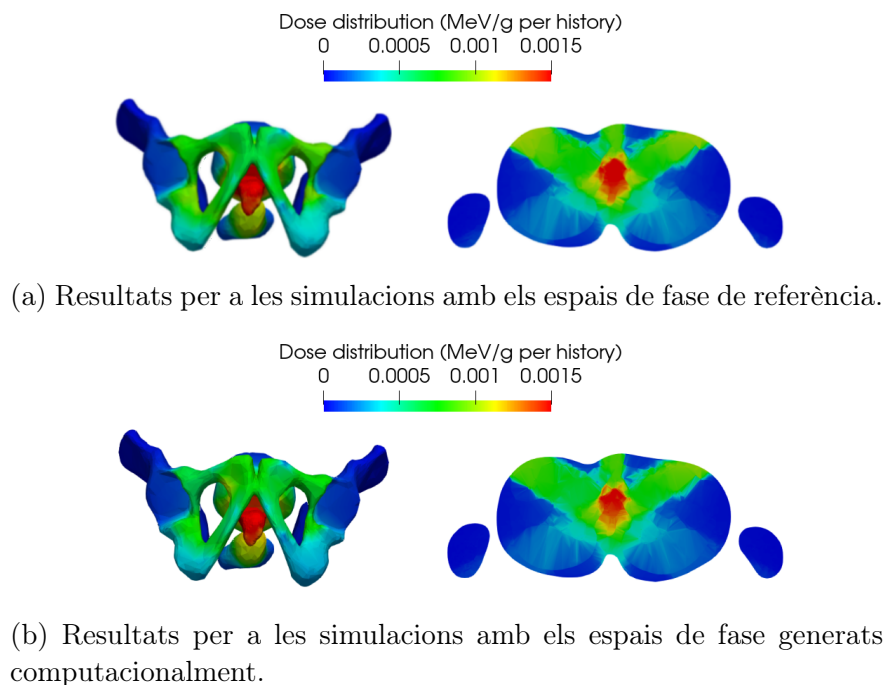


Figura II.24: Distribució de dosi per als òrgans d'interès del maniquí MRCP en un tractament de pròstata. A la part esquerra es mostra la distribució 3D de dosi i la part dreta un tall d'interès.

Òrgan	Pròstata	Pelvis	Bufeta	Recte
Diferència relativa de la dosi absorbida (%)	1.1	1.3	2.15	2.5

Taula II.10: Diferència relativa de la dosi absorbida per cadascun dels òrgans d'interès entre el tractament complet executat amb els espais de fase de referència i els generats computacionalment.

II.4 Incorporació de geometries CAD a penRed.

Referència: S. Oliver, S. Rodríguez-Boscà, V. Giménez-Alventosa: **Enabling Particle Transport on CAD-Based Geometries for Radiation Simulations with penRed.** *Computer Physics Communications.* (2024). Elsevier.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109091>

Categoria JCR: PHYSICS

Posició: 2/56

Quartil: Q1

Factor d'impacte (2022): 6.2

II.4.1 Introducció i motivació.

Com s'ha discutit a la Secció I.3.3, la definició de geometries per descriure el sistema és una part fonamental de qualsevol simulació, independentment del codi MC que s'utilitze. Malauradament, la seua construcció és un procés tediós, costós i on, fàcilment, s'introdueixen errors. Per minimitzar estos problemes, i per proporcionar suport a l'hora de definir superfícies complexes i orgàniques, molts codis han implementat la capacitat per simular sobre geometries construïdes mitjançant eines de disseny CAD.

Per exemple, el Geant4 ja ho va incloure en 2004 implementant la classe `G4Tet` [152], per simular sobre malles volumètriques irregulars, on s'empren tetraedres com elements de volum. Per tal de crear la malla volumètrica a partir de malles superficials, implementaren la classe `G4TessellatedSolid`, permetent així la importació directa de models CAD. No obstant, aquesta metodologia requeria un gran nombre d'elements per a modelitzar geometries complexes de forma precisa, traduint-se en llargs temps de còmput. Es per açò, que en 2013 es va desenvolupar una nova classe anomenada `DagSolid` [153], la qual, emprà tècniques d'acceleració per al traçat de rajos i redueix el temps de còmput, segons els autors, en un factor entre 53 i 685.

La classe `DagSolid` està basada en el paquet de programari *Direct Accelerated Geometry for the Monte Carlo (DAGMC)* [154]. Este, accelera el càlcul de traçat de rajos mitjançant caixes delimitadors orientades (*Oriented Bounding Box (OOB)*), les quals contenen els elements que defineixen la malla. Les caixes s'organitzen de forma jeràrquica en una estructura en forma d'arbre amb diferents nivells, reduint el nombre d'interseccions a calcular en el moviment de les partícules. A més del Geant4, els autors del DAGMC han integrat el seu paquet en diferents codis MC, incloent MCNP5 [155], MCNP6, FLUKA, Tripoli4, OpenMC i Shift. En el cas de MCNP, en la versió 6, LANL va desenvolupar en el 2012, a més, una extensió per a simular sobre malles volumètriques no estructurades, [156] sense la necessitat d'eines externes, com s'ha mostrat en els primers tres treballs d'aquesta tesi, on s'ha fet ús d'aquesta capacitat de MCNP6.

Altres codis implementen també la capacitat de modelitzar geometries complexes emprant mallats tant volumètrics com de superfície, com per exemple el EGSnrc amb la classe `EGS_Mesh`. No obstant, centrant-se en els codis basats en la llibreria PENELOPE, no existia, a data de publicació de l'article, una eina que permetera emprar aquest tipus de geometries mallades amb les darreres versions de PENELOPE. De fet, l'eina coneguda com *penmesh* [157], publicada al 2008, proporcionava aquesta característica per a la versió de PENELOPE

de 2006. Malauradament, fins on arriba el coneixement dels autors, el manteniment del *penmesh* està discontinuat i no és accessible actualment. Per tant, hi ha una manca clara, per als usuaris de codis basats en PENELOPE, per poder simular sobre geometries CAD.

Com s'ha vist, els beneficis inherents de la modelització dels sistemes geomètrics mitjançant CAD, han propiciat que es desenvolupen eines específiques per a la majoria de codis de simulació. Tant és així que organitzacions com la ICRP, proporcionen els seus models de maniquins computacionals detallats, en geometries mallades, incloent diferents formats segons el codi específic de simulació, com s'ha explicat en la Secció I.4.2.1.

Per tant, el desenvolupament d'un mòdul de geometria que done suport a aquesta característica en *penRed* beneficiarà, no sols als seus usuaris, sinó a tots els usuaris de la llibreria PENELOPE.

Aquest fet permetrà realitzar simulacions sobre geometries proporcionades directament en arxius CAD, la qual cosa és d'especial interès quan es pretén realitzar comparacions de resultats amb diferents codis de simulació, evitant així que les possibles diferències entre els resultats siguin degudes a errors a l'hora de construir la geometria.

II.4.2 Objectius de l'estudi.

L'objectiu del present treball és el desenvolupament d'un mòdul de geometria en *penRed*, per proporcionar la capacitat de simular sobre models CAD.

II.4.3 Materials i mètodes.

Com s'ha mostrat a la Secció I.3.3, es poden emprar dos mètodes per modelitzar geometries complexes i orgàniques de forma precisa. D'una banda, utilitzar malles no estructurades volumètriques o, d'altra, superfícies mallades per definir els objectes. Noteu que les malles regulars no tenen la capacitat d'ajustar-se a superfícies complexes, pel que no es consideraran. A més, aquesta característica ja està implementada a *penRed* per mitjà de les geometries voxelitzades.

Donat que en les simulacions de transport de radiació les partícules es simulen individualment, en compte de ser simulades com una substància que ompli el sistema geomètric, com trobem a les simulacions de mètodes finits, no és realment necessari emprar malles volumètriques per a les simulacions, ja que no és necessari parametritzar l'estat del sistema en cada element de volum. Per tant, la geometria es pot modelar simplement definint les superfícies dels objectes que la conformen.

Per este motiu, i els discutits a la Secció I.3.3, es va decidir parametritzar les geometries mitjançant superfícies mallades en compte de malles volumètriques. Específicament, s'empraran malles triangulars, ja que és un problema molt estudiant en computació gràfica [158, 159, 160]. L'algorisme que s'emprarà per calcular les interseccions entre les trajectòries de les partícules i els triangles de les malles és el presentat per Möller [158], el qual proporciona un bon balanç entre ús de memòria i velocitat de còmput.

II.4.3.1 Algorisme.

Per tal d'implementar aquesta característica, s'han d'acomplir els requisits que s'expliquen al manual d'implementació de *penRed* per a mòduls de geometria. S'assegura així, que el mòdul implementat serà compatible amb tots els ja existents, siguin fonts de partícula, registres, tècniques de reducció de variància, etc. i, a més, es podrà emprar directament en

simulacions paral·leles, tant multifil, com MPI o combinant ambdues. Els requisits es llisten a continuació:

- La geometria està constituïda per cossos amb un únic material. En aquest cas, cadascun està delimitat per una superfície mallada.
- El material amb índex 0 està reservat per al buit.
- Opcionalment, als cossos se'ls pot assignar un identificador de detector.
- Es considera una **interfície** a un canvi de **material** o **detector** entre dos cossos. Per tant, dos cossos en contacte que compartisquen el mateix índex de material, no formen una interfície, a no ser que tinguin assignats diferents índex de detector.
- Una partícula escapa de la geometria si no pot arribar a cap regió amb un material diferent al buit.
- Quan s'arriba a una interfície, la partícula ha d'aturar-se, a no ser que el material darrere de la interfície siga buit. En este cas, la partícula s'ha de moure a través del buit fins que trobe una regió amb un material no buit, o escape de la geometria.

A més dels requisits generals, per tal de millorar la velocitat del còmput sense comprometre la flexibilitat de la construcció de geometries, s'ha imposat que els objectes no poden solapar-se, entenent-se com que les seues superfícies es creuen. No obstant, sí que es permet que les superfícies de dos o més cossos es superposen, és a dir, compartisquen frontera. Aquesta restricció no és una gran limitació a l'hora de definir el sistema, degut a la gran flexibilitat que ofereixen les superfícies mallades. No obstant, permet estructurar els cossos que formen la geometria en un arbre jeràrquic, on cada cos inclou completament a la seua descendència. Es limita així el nombre de superfícies a comprovar a l'hora de moure una partícula a la descendència i progenitor del cos actual (Figura 2 de l'article).

No obstant, s'hauran de tindre en compte, també, els cossos les superfícies dels quals es solapen amb les interfícies travessades, ja que la partícula podrà acabar en un cos més enllà de la descendència o progènie directa del cos actual. Un exemple es mostra a la Figura 3 de l'article, on la part dreta mostra l'arbre jeràrquic dels cossos, corresponent a la geometria mostrada a l'esquerra. A més, a la figura esquerra, l'inici i final de cada fletxa indica la posició inicial i final, respectivament, d'una partícula en moviment.

Noteu que, a l'exemple anterior, el cos *World* presenta un comportament especial, ja que d'este parteixen la resta de cossos i no té progenitor. Per tal de millorar l'eficiència de la simulació, s'han fixat unes restriccions especials a aquest tipus de cos. En primer lloc, tota simulació ha de contindre un únic cos sense progenitor. A més, es considerarà que tota partícula que travesse la seua frontera, cap a fora, escapa del sistema geomètric. Finalment, la superfície d'este cos no pot superposar-se amb la de cap altre cos, per motius d'eficiència.

Per no estendre de més l'explicació, no es descriuran els detalls concrets de l'algoritme implementat en aquesta secció. Si més però, es poden trobar tant al codi font del repositori de penRed¹, com a la descripció de l'article i el pseudocodi de l'Apèndix A del mateix.

¹<https://github.com/PenRed/PenRed>

II.4.3.2 Construcció de geometries.

Com la majoria de codis, penRed defineix un format propi per llegir les geometries, on s'inclou la jerarquia dels cossos definits i el material del que estan constituïts. No obstant, no és necessari que els usuaris creen o convertisquen manualment les superfícies mallades a aquest format, el que pot ser tediós i dificultar el procés de construcció. Per evitar eixe procés, s'ha desenvolupat un *plugin* dins del programari Blender², que permet l'exportació directa de les geometries creades al seu entorn en el format de penRed. Més encara, tot i que Blender proporciona un entorn gràfic amb eines simples i potents per a la construcció de geometries CAD, si l'usuari prefereix emprar un altre programari, les geometries construïdes poden ser importades en Blender i posteriorment exportades a penRed. Açò és possible gràcies a que Blender és compatible amb un gran nombre de formats estàndard, incloent ABC, USD, OBJ, FBX, PLY o STL, entre altres. Per tant, a través d'aquest, penRed és també compatible amb molts altres formats. Tot i això, per si es necessita crear un convertidor per a un format específic, el format de penRed s'ha definit per a ser el més senzill possible i tots els seus detalls estan descrits a la documentació del paquet.

II.4.3.3 Validació i optimització.

En primer lloc, per tal de validar el mòdul implementat, s'han reproduït els exemples proporcionats per la llibreria PENELOPE, que també es distribueixen al paquet penRed. Les versions originals dels exemples, estan configurades per treballar amb geometries quàdriques, i s'han creat geometries equivalents mallades per tal de comparar ambdós resultats. Els detalls de cadascun es poden trobar tant a l'article com a la documentació de penRed. Cal remarcar que, per tal d'adaptar els exemples de quàdriques a mallats, l'únic que s'ha hagut de fer és generar la nova geometria mallada equivalent i modificar la configuració que afecta a aquesta. És a dir, la configuració de les fonts de partícules, registres, i altres mòduls no es veu afectada, gràcies a la compatibilitat entre mòduls proporcionada per penRed.

D'altra part, s'ha realitzat una simulació emprant la geometria del maniquí MRCP proporcionat per la ICRP, descrit en la Secció I.4.2.1. Aquesta ha consistit en considerar el fetge com una font emissora isòtropa de fotons d'1 MeV. S'ha triat aquest cas ja que la pròpia ICRP proporciona els resultats de dosi en tots els òrgans del maniquí per a una simulació equivalent. D'aquesta manera, els resultats de la simulació realitzada amb penRed, s'han pogut comparar amb els resultats equivalents proporcionats per la ICRP obtinguts amb MCNP6.

Finalment, s'han emprat diverses tècniques d'optimització a l'hora d'implementar el mòdul, per tal de millorar l'eficiència. Aquestes, es centren en reduir el nombre d'interseccions a calcular entre el moviment de la partícula i els triangles de les superfícies que conformen la geometria, i es llisten a continuació:

- **Jerarquia de cossos:** com ja s'ha explicat, organitzar els cossos que componen la geometria en una jerarquia en forma d'arbre, permet limitar el nombre de superfícies que s'han de comprovar.
- **Octrees:** en compte de comprovar les interseccions de la partícula amb tots els triangles d'una superfície donada, aquests s'agrupen en regions espacials definides per caixes. Per tant, abans de calcular una intersecció partícula-triangle, primer es comprova que la trajectòria de la partícula travessarà la regió a la que pertany l'esmenat

²<https://www.blender.org/>

triangle. Si la partícula no travessa la regió, l'algoritme conclou que esta no travessarà cap dels triangles al seu interior, reduint significativament el temps de còmput.

Més encara, aquest esquema es pot repetir agrupant les regions que contenen als triangles en super-regions d'un nivell superior, creant una jerarquia de diferents nivells de regions.

En penRed s'han establert tres nivells en la jerarquia de regions. En primer lloc, el primer nivell consta d'una única regió que inclou tots els triangles de la superfície. Després, les regions del segon nivell agrupen les sub-regions del tercer nivell, les quals contenen, finalment, els triangles de la superfície que hauran de ser comprovats.

Tota la subdivisió de cada superfície en aquesta estructura de regions, o *octrees*, es realitza automàticament al inicialitzar la geometria, sent transparent a l'usuari. No obstant, els usuaris poden especificar el nombre d'elements desitjat, en mitjana, en cada nivell de regió de cada superfície, per tal d'optimitzar cada cas concret.

- **Esfera de col·lisió:** s'ha afegit una esfera al voltant de cada triangle per comprovar si la partícula pot col·lidir amb aquest. Abans de calcular la intersecció partícula-triangle, es calcula la distància entre el raig de la partícula i el centre del triangle. Si la distància és major que el radi de l'esfera, el triangle no es pot crear i s'ignora.

II.4.4 Resultats.

II.4.4.1 Validació.

Per dur a terme la validació inicial, es van comparar les simulacions corresponents als exemples del paquet de PENELOPE, d'una part emprant les geometries basades en quàdriques i d'altra les basades en malles. Els resultats per a cada parell de simulacions per a cadascun dels exemples són estadísticament compatibles en tots els casos, mostrant una correcta implementació del transport en geometries mallades. Per validar, amb major detall, la compatibilitat entre els resultats amb els dos tipus de geometries, i confirmar que no existeixen diferències sistemàtiques significatives, es va fer una comparació entre els resultats de tots els registres mesurats, bin a bin. L'anàlisi mostra que les diferències entre cada parell de simulacions (quàdriques i malles) estan per sota de 3σ i distribuïdes uniformement al voltant de zero. Aquest resultat indica que les possibles incerteses introduïdes per les diferències en la geometria i el model de transport, no són significatives en comparació amb les incerteses estadístiques inherents a la simulació MC.

A part d'aquests exemples de validació, es va realitzar una simulació sobre una geometria complexa: el maniquí computacional MRCP, tal i com ja s'ha explicat. El temps de còmput total emprant penRed, va ser inferior a 8 h, incloent el temps d'inicialització i pre-processament de la geometria. Pel que fa a l'ús de memòria, es va requerir 1.75 GB i es van emprar 20 fils en paral·lel en una màquina amb les següents especificacions: Intel(R) Core(TM) i9-10900K CPU, 3.70GHz amb 64GB de memòria RAM.

Els resultats de dosi obtinguts per a cadascun dels òrgans es van comparar amb els proporcionats per la ICRP per a MCNP6, mostrant diferències relatives en el 81% dels casos inferior a l'1%, en el 15% dels casos entre l'1% i 2% i un únic valor mostrant un 3.2% de diferència relativa (representant un 4% dels òrgans comparats). La Figura II.25, mostra la distribució d'energia dipositada en la regió propera a la font emissora (fetge).

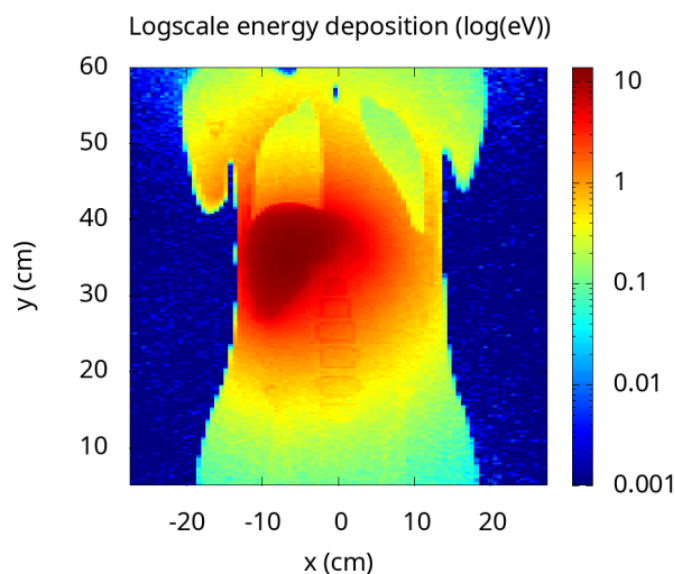


Figura II.25: Distribució de l'energia dipositada en la regió d'interès del maniquí MRCP. Simulació executada en penRed considerant el fetge com a font emissora de fotons d'1 MeV.

Cal assenyalar la bondat dels resultats obtinguts tenint en compte els diferents factors que poden ocasionar discrepàncies entre els resultats. Per exemple, al tractar-se de codis diferents, cadascun utilitza models de física i bases de dades de materials distintes. A més, els resultats provinents de MCNP6 s'han obtingut per a una geometria amb malla volumètrica no estructurada amb tetraedres com a elements de volum, mentre que les malles de penRed son superficials.

II.4.4.2 Optimització.

En aquesta secció, s'han realitzat diverses proves per tal d'avaluar l'impacte de les tècniques d'optimització discutides anteriorment. En aquestes proves, realitzades amb la geometria del maniquí MRCP, es van modificar el nombre d'elements continguts a les regions en cada nivell dels *octrees*. Els resultats estan recollits a la Taula 3 de l'article, i mostren que la velocitat de simulació depèn fortament dels valors escollits. Per tant, es recomana realitzar simulacions curtes amb diferents valors d'aquests paràmetres abans de realitzar la simulació completa en qüestió. Açò permetrà maximitzar el rendiment de la simulació, la qual cosa és important, especialment en simulacions amb elevats temps de computació com són, en general, les que es realitzen en l'àmbit de la física mèdica on es requereixen incerteses de tipus A molt baixes. Cal remarcar que, en els tests d'optimització dels *octrees*, per simplicitat, s'han aplicat valors globals a tots els objectes de la geometria. No obstant, penRed permet especificar aquests paràmetres per a cada objecte de forma individual, el que probablement permet optimitzar encara més el temps de còmput.

Finalment, la mateixa simulació es va dur a terme per avaluar l'impacte d'emprar les esferes de col·lisió descrites. En concret es van emprar els paràmetres òptims d'*octrees* obtinguts. Com a resultat, la velocitat augmenta en un 43% si s'empren les esferes de col·lisió als triangles, la qual cosa mostra l'avantatge d'haver implementat aquesta tècnica d'optimització.

II.4.5 Article.

S'adjunta a continuació la versió d'autor de l'article original d'aquest treball, on es poden trobar els detalls del mateix i la bibliografia corresponent.

Enabling Particle Transport on CAD-Based Geometries for Radiation Simulations with penRed

S. Oliver^a, S. Rodriguez Bosca^b, V. Giménez-Alventosa^{c,d,*}

^a*Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM)
Universitat Politècnica de València
Camí de Vera s/n, 46022, València, Spain*

^b*European Laboratory for Particle Physics, CERN, 1211 Geneva 23, Switzerland*

^c*Departament de Física Atòmica, Molecular y Nuclear, Universitat de València (UV),
46100 Burjassot, Spain*

^d*Institut de Física Corpuscular, IFIC (UV-CSIC), 46100 Burjassot, Spain*

Abstract

Geometry construction is a fundamental aspect of any radiation transport simulation, regardless of the Monte Carlo code being used. Typically, this process is tedious, time-consuming, and error-prone. The conventional approach involves defining geometries using mathematical objects or surfaces. However, this method comes with several limitations, especially when dealing with complex models, particularly those with organic shapes. Furthermore, since each code employs its own format and methodology for defining geometries, sharing and reproducing simulations among researchers becomes a challenging task. Consequently, many codes have implemented support for simulating over geometries constructed via Computer-Aided Design (CAD) tools. Unfortunately, this feature is lacking in penRed and other PENELOPE physics-based codes. Therefore, the objective of this work is to implement such support within the penRed framework.

Keywords: Radiation transport; PENELOPE physics, Monte Carlo simulation; penRed; CAD; Triangular surface mesh

*Corresponding author.
E-mail address: gialvi@uv.es

NEW VERSION PROGRAM SUMMARY

Program Title: Parallel Engine for Radiation Energy Deposition (penRed)

CPC Library link to program files: (to be added by Technical Editor)

Developer's repository link: <https://github.com/PenRed/PenRed>

Code Ocean capsule: (to be added by Technical Editor)

Licensing provisions: GNU Affero General Public License (AGPLv3)

Programming language: C++ standard 2011.

Journal reference of previous version:

<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>[1]

Does the new version supersede the previous version?: Yes

Reasons for the new version:

Implements the capability to simulate on CAD constructed geometries, among many other features and fixes.

Summary of revisions:

All changes applied through the code versions are summarized in the file *CHANGELOG.md* in the repository package.

Nature of problem:

While Monte Carlo codes have proven valuable in simulating complex radiation scenarios, they rely heavily on accurate geometrical representations. In the same way as many other Monte Carlo codes, penRed employs simple geometric quadric surfaces like planes, spheres and cylinders to define geometries. However, since these geometric models offer a certain level of flexibility, these representations have limitations when it comes to simulating highly intricate and irregular shapes. Anatomic structures, for example, require detailed representations of organs, tissues and bones, which are difficult to achieve using basic geometric objects. Similarly, complex devices or intricate mechanical systems may have designs that cannot be accurately represented within the constraints of such geometric models. Moreover, when the complexity of the model increases, geometry construction process becomes more difficult, tedious, time-consuming and error-prone [2]. Also, as each Monte Carlo geometry library uses its own format and construction method, reproducing the same geometry among different codes is a challenging task.

Solution method:

To face the problems stated above, the objective of this work is to implement the capability to simulate using irregular and adaptable meshed geometries in the penRed framework. This kind of meshes can be constructed using Computer-Aided Design (CAD) tools, the use of which is very widespread and streamline the design process. This feature has been implemented in a new geometry module named "MESH_BODY" specific for this kind of geometries. This one is freely

available and usable within the official penRed package ¹. It can be used since penRed version 1.9.3*b* and above.

References

- [1] V. Giménez-Alventosa, V. Giménez Gómez, S. Oliver, PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE, *Computer Physics Communications* 267 (2021) 108065. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>.
- [2] Paul P.H. Wilson, Timothy J. Tautges, Jason A. Kraftcheck, Brandon M. Smith, Douglass L. Henderson, Acceleration techniques for the direct use of CAD-based geometry in fusion neutronics analysis, *Fusion Engineering and Design* 85 (2010) doi: <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.05.030>.

1. Introduction

Monte Carlo (MC) simulations of radiation transport are currently applied in several fields of research such as: radiation therapy and protection, electromicroscopy, x-ray fluence, accelerator technology and detector characterisation, among other applications. Due to the huge amount of possible applications, and with the purpose of covering different configurations of the simulation system (particle types, physics models, energy ranges, geometry types, etc), several MC codes have been developed over the years. Some of them are EGSnrc [1], MCNP [2], PENELOPE [3], Geant4 [4], PHITS [5] or FLUKA [6]. In addition to these codes, there are many others that stem from them, specialized in specific applications or adding new capabilities.

One of the latest additions to this list of MC frameworks is the Parallel ENgine for Radiation Energy Deposition (penRed) code [7], a highly parallel, efficient, and adaptable framework for MC simulations. Written in C++, penRed incorporates the physics and functionalities of PENELOPE, making it a general purpose framework. In addition, penRed includes many other tallies and functionalities, especially for the field of medical physics [8].

¹<https://github.com/PenRed/PenRed>

While MC codes have proven valuable in simulating complex radiation scenarios, they rely heavily on accurate geometrical representations. In the same way as many others MC codes listed, penRed employs simple geometric quadric surfaces like planes, spheres and cylinders to define geometries. However, since these geometric models offer a certain level of flexibility, these representations have limitations when it comes to simulating highly intricate and irregular shapes. Anatomic structures, for example, require detailed representations of organs, tissues and bones, which are difficult to achieve using basic geometric objects. Similarly, complex devices or intricate mechanical systems may have designs that cannot be accurately represented within the constraints of such geometric models. Moreover, when the complexity of the model increases, geometry construction process becomes more difficult, tedious, time-consuming and error-prone [9].

In addition to this type of geometry construction, some MC codes, including penRed, allow the use of voxelized geometries. This can be useful when simulating, for example, phantoms based on scanner images. However, voxelized phantoms have a drawback in that they offer limited resolution due to the size of the voxels. Another complication is the lack of flexibility, making them challenging to translate or deform objects within the phantom in a simple way.

At present, due to the advancements in computer-aided design (CAD) technologies, the usage of software tools based on a graphical user interface (GUI) for three-dimensional geometry construction has significantly increased in recent years. Using CAD software, it is possible to create more complex and flexible 3D geometries with less effort and difficulty compared to create them using a set of primitive solids. Furthermore, CAD geometries help streamline the process of their constructions, especially when simulating elements of experimental setups that have been previously designed using this type of software. This approach avoids introducing user-induced errors in the geometry, which results in reducing errors in the MC simulation, saving time and effort in the geometry creation processes. This can be particularly usable when combining geometries with structural information from patients and applicators, for example.

To address these limitations of mathematical surfaces and voxelized geometries, some MC codes have implemented the possibility of defining geome-

tries based on triangular meshed surfaces or irregular volumetric meshes of tetrahedral volumes, allowing the straightforward definition of complex structures using existing 3D design codes. Both approaches are flexible enough to accurately represent complex structures in three dimensions. For these reasons, such modeling capabilities have become increasingly prevalent in fields such as medical physics, radiation therapy and biomedical engineering, where accurate representation of complex anatomical structures and devices is crucial for precise simulations and treatment planning. Moreover, as this kind of geometry definition can be converted from standardized mesh formats, this approach streamlines the reproduction of simulations with different codes and research groups since the geometry can be shared easily.

Therefore, to achieve the benefits stated above, the objective of this work is to implement the capability to simulate on irregular and adaptable meshed geometries in the penRed framework. This has been done implementing a new geometry module named “MESH_BODY” specific for this kind of geometries, which is freely available and usable within the official penRed package ². It can be used since penRed version 1.9.3*b* and above.

2. State of the art

In this section the authors aim to describe the meshed geometries supported by different transport codes.

In 2004, Geant4 implements the `G4Tet` class to allow the capability of realize a tetrahedral meshes using a large number of individual tetrahedron objects: `G4Tets` [10]. Besides this feature, the `G4TessellatedSolid` class allows to implement directly in Geant4 a CAD-based geometry as polygon-mesh. However, when a very accurate modeling is need or a highly complex geometries are intended to be used, a large number of facets are required, which results in a long computation time. In 2013, with the aim to address this speed limitation, a new Geant4 solid class, `DagSolid` was developed [11].

The `DagSolid` class is based on the direct accelerated geometry for the Monte Carlo (DAGMC) [9]. This software package consists on a ray-tracing acceleration using a hierarchical structure of oriented bounding box (OBB)

²<https://github.com/PenRed/PenRed>

tree with the aim of improving the calculation speed of interference detection. The authors of this work have been integrated DAGMC into many Monte Carlo radiation codes, including MCNP5 [12], MCNP6, Geant4, FLUKA, Tripoli4, OpenMC, and Shift codes. As example case, the integration with MCNP5 has been used to perform fusion neutronics analysis [9]. Later, in 2012, Los Alamos National Laboratory (LANL) develops an extension in MCNP version 6 to provide the capability for neutrons and photon tracking on an unstructured mesh [13] with no need of external tools.

Moreover, several other codes offer the ability to simulate intricate geometries, using methods like tetrahedral unstructured meshes or triangular surface meshes, to face the difficulties stated above. For instance, EGSnrc [1] includes the *EGS_Mesh* class for this specific purpose.

Speaking about PENELOPE-based codes, the tool penmesh [14] was designed to work with geometric structures based on triangular mesh surfaces and relies on the PENELOPE 2006 libraries. However, as far as the authors know, penmesh is no longer actively supported or available for use with the most recent PENELOPE versions. As a result, not only users of penRed but also those who use PENELOPE directly can find value in having this capability integrated.

3. Material and Methods

The problem addressed in this work is not how to implement a ray-tracing algorithm for mesh-based geometries, as it is a well-known problem in computer graphics. Instead, the goal is on efficiently implementing it in the penRed environment to facilitate simulations in complex and organic geometries. To achieve it, this section describes the types of meshes that will be supported and outline a generic algorithm for incorporating new geometries into the penRed framework. Then, the validation tests and benchmarks are detailed.

3.1. Surface versus volumetric unstructured meshes

Firstly, we must decide whether to implement transport on volumetric or surface-based meshes in order to achieve the best balance for our simulations.

Volumetric unstructured meshes are commonly employed in finite element simulations, such as computational fluid dynamics problems [15]. In such scenarios, complex geometries are discretized into small volume elements

(see Figure 1), with each element storing the local mean state of the substance within its corresponding volume. These local states are then utilized to update the entire system based on a physical model, typically involving interactions with neighboring volume elements.

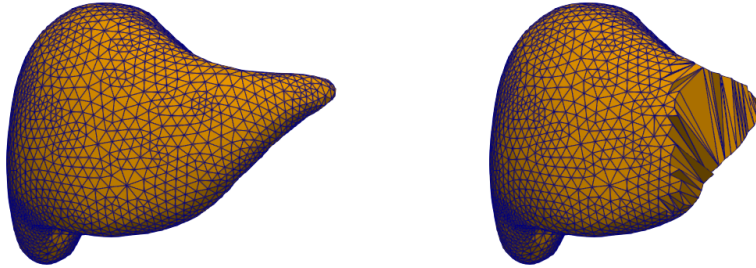


Figure 1: Volumetric meshed liver model from the adult mesh-type reference computational phantom of the ICRP Publication 145 [16]. At left, the external surface of the liver is shown. On the right image, the same model was cut to show the internal structure with volumetric elements.

However, in radiation transport simulations, particles are individually simulated rather than being modeled as a substance filling the entire geometric system. Consequently, the discretization into smaller volume elements becomes unnecessary, and the geometry can be effectively represented using only the surface mesh with an empty interior volume. This approach is similar to the techniques employed in video games or animation rendering.

To determine the most suitable approach for penRed, we will analyze the advantages and disadvantages of both volumetric and surface-based meshes. It is important to note that regular volumetric meshes, such as voxelized geometries, are not under consideration, as they lack the capability to accommodate complex and organic surfaces and are already integrated into the penRed package.

On one hand, unstructured volumetric meshes use larger amount of memory to store the geometry compared to their surface-based counterparts. This is because the extra discretization of the geometry in smaller volume elements. The number of those elements depends on the desired resolution and the boundary shapes. Nevertheless, one advantage of volumetric meshes is the possibility to calculate magnitudes within the mesh element volumes

themselves, especially useful for visualization and when the bodies are heterogeneous, as each element can be assigned different physical properties. However, in many simulations, we use homogeneous media within each body, and the region to be visualized is not the entire geometry. Consequently, volumetric meshes introduce memory wastage in regions where the simulation does not tally results. If necessary, it may be more efficient to create a detailed volumetric mesh to tally results only in the regions of interest.

On the other hand, performance strongly depends on the geometry, simulation parameters, and the optimization techniques applied in each case. However, regardless of the type of mesh used, the fundamental calculation for particle transport involves determining the intersection point of the particle track with either the volume elements for unstructured volumetric meshes or the surfaces of objects for surface-based geometries. This task is commonly referred to as the ray-tracing problem. In both cases, triangles are commonly employed to define both volume elements and object surfaces, simplifying the performance comparison to the number of triangles that need to be checked for particle transport.

In the case of volumetric meshes, the calculation of ray-tracing depends on the number of inner volume elements and can escalate rapidly, especially for high resolutions or organic objects with intricate surfaces. Alternatively, for surface-based meshes, employing techniques like octrees to subdivide surfaces into regions, minimizing the number of ray-tracing checks [14], enables us to restrict the testing of surface triangles to a small region close to the particle track. Moreover, even for complex geometries, the required memory is typically small enough to store the entire surface in GPU memory, allowing the simulation to leverage GPU acceleration for ray-tracing. However, implementing GPU acceleration for particle transport is beyond the scope of this work and may be considered in future versions.

For these reasons, in this work, we implement particle transport using ray-tracing on surface meshes. Specifically, we use triangular meshes, as this is a well-studied problem in computer graphics [17, 18, 19]. The algorithm used to calculate the ray-triangle intersection was presented by Möller [17], providing a good balance between memory usage and speed.

3.2. Algorithm

In this section, the algorithm implemented in penRed to model the particle tracking through geometries as a ray-tracing problem with surface-based elements is described.

In this algorithm, some restrictions will be imposed on the geometry definition in order to speed up the calculation without affecting the geometry construction flexibility. First, objects cannot intersect, understanding it as their surfaces crossing, but overlapping surfaces is allowed. This is not a significant limitation since the surface mesh provides enough flexibility to prevent object intersections. This approach allows us to structure the geometry objects with a genealogical tree as it is shown in Figure 2, where each body completely contains its daughters.

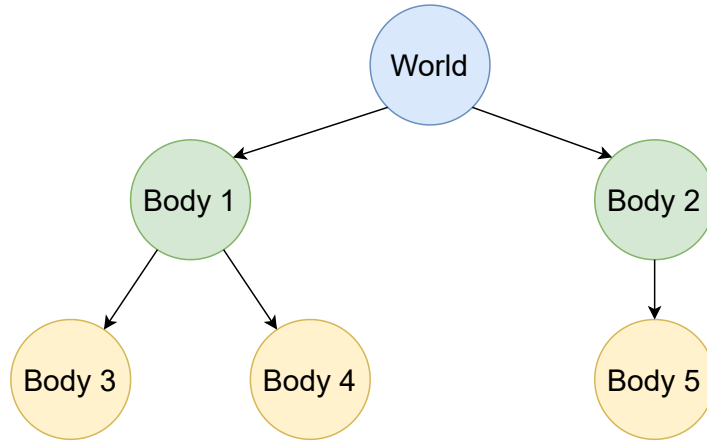


Figure 2: Object genealogical tree.

Hence, there is no necessity to calculate the ray-tracing for all existing body surfaces to perform particle movement within the geometry, resulting in a reduction of the overall computational cost. In the initial stage, a particle situated within a specific body only needs to check its boundaries and the immediate offspring boundaries. Therefore, during this initial check, particles exclusively consider the bodies connected on the genealogical tree with the one containing them. However, upon crossing a boundary, it is essential to test if it overlaps with another surface. In such instances, the particle can skip intermediate bodies in the genealogical tree. The left image of Figure 3 provides an example geometry which illustrates various overlapping cases, where each arrow denotes the movement of a particle within the geometry system. The starting point of the arrow indicates the initial body of the particle, while the endpoint indicates the final body after the particle movement. In addition, the right image of the Figure 3 represents the corresponding genealogical tree. The three represented cases are described following,

- The top arrow is going from *Body 1* to *Body 3*. In this case, the particle skip the intermediate *World* body in the genealogical tree path, because bodies *1* and *3* share both, parent (*World*) and the crossed boundary by the particle.
- The bottom-left arrow is going directly from *World* to *Body 2*, although *Body 2* is not a direct *World* daughter, skipping *Body 1* in the genealogical tree path.
- Analogous to previous case, bottom-right arrow goes directly from *Body 2* to *World*, because the common boundary between *Body 1* and *Body 2* is crossed by the particle.

To determine if two or more bodies can share their boundaries, a collision box is constructed for each one, including all the body mesh triangles. Furthermore, this collision box is also used to check if a particle can cross any body triangle, avoiding calculations for distant bodies to speed up the simulation.

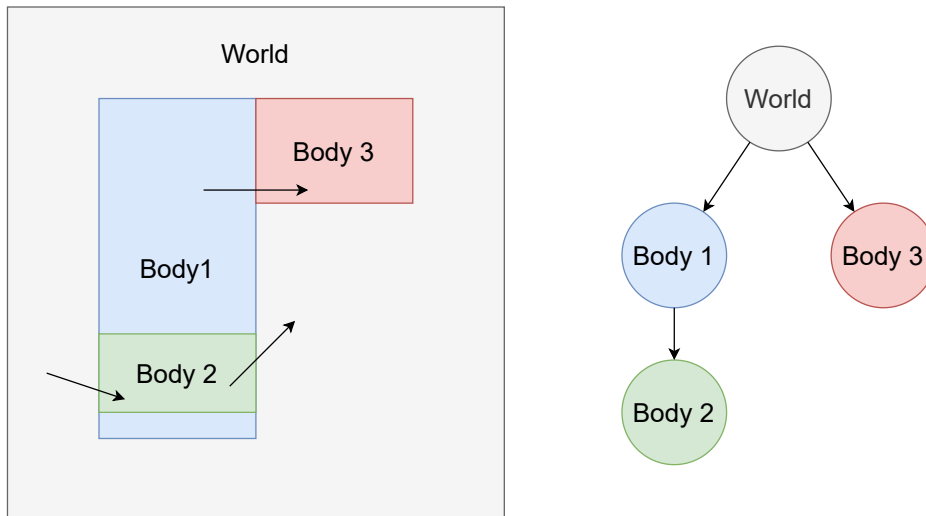


Figure 3: Overlapping objects example. Geometry representation (left) and the corresponding genealogical tree (right). The geometry arrows represent particles crossing between objects.

As illustrated in the previous example, the handling of the *World* body differs from others due to its lack of a parent. Consequently, if a particle

crosses the *World* surface outward, it escapes from the geometry system. Furthermore, the *World* is treated as a surrounding object and is therefore not permitted to share boundaries with other bodies.

All these restrictions have been considered when defining the algorithm to move the particle within the geometry. Following the nomenclature used in PENELOPE and penRed, the geometry class method responsible for this process is the *step* function. The corresponding pseudocode is presented in Code 1, in the Appendix A, and described in this section.

In addition, generic assumptions required by any penRed geometry must be satisfied. These are outlined below:

- The geometry must consist of bodies filled with a single material. In this case, each body is confined by a mesh surface.
- **Material** index 0 is reserved for void regions.
- Optionally, bodies can be assigned a **detector** identifier.
- An **interface** is defined as a change in **material** or **detector** between bodies. Consequently, two bodies in contact with the same material do not constitute an interface unless they belong to different detectors.
- A particle escapes from the geometry system if it cannot reach a non-void region.
- When reaching an interface, the particle must be stopped unless the new material after crossing the interface is void. In such cases, the particle must be moved through the void until a non-void region is reached, or the particle escapes from the geometry.

For brevity, some functions of the code are not shown in this document. However, the complete code can be found in the penRed repository³. Note as well that this algorithm can be used to implement any geometry based on a single or collection of objects, as it is independent of their structure as long as it fulfills the penRed restrictions for geometry modules. These ones are detailed in the implementation documentation located in the penRed repository⁴.

³<https://github.com/PenRed/PenRed>

⁴doc/PenRed_implementation_guide.pdf

The particle state includes information such as the position, direction, body, and material identifiers, among other quantities irrelevant to tracking. This information is necessary for the *step* routine, which needs to know the particle starting body and construct the ray based on the particle position and direction. Additionally, the *step* routine requires the maximum distance to travel in the current material (*DS*) and information about the geometry bodies (*bodies*), including the *world*.

As outputs, the *step* routine is expected to provide the updated particle state, including changes in position, material, and body index if a boundary has been crossed. It also calculates the distance traveled inside the original material (*DSEF*), the total distance traveled (*DSTOT*), considering the possibility of crossing void regions, and the number of bodies crossed (*NCROSS*).

Initially, the algorithm checks if the particle is inside the geometry system (Line 4). If not, the particle body index is expected to exceed the total number of bodies contained in the geometry. If it is outside, the algorithm then verifies if the particle is directed towards the *world* body. In that case (Lines 5 – 15), if the *world* has a non-void material, the particle movement is halted due to the material change (Lines 12 – 14). Otherwise, particle tracking continues, as the void region must be traversed. If the particle does not reach the geometry, it escapes, and the tracking terminates (Lines 16 – 23).

Next, we need to determine if the particle is within a void region or not, setting the *isInVoid* flag accordingly (Lines 26 – 29). Although the particle cannot be stopped in a void region once its simulation starts, it might be sampled in those regions before being moved to start the simulation. Subsequently, a loop initiates (Line 32), iterating over bodies as the particle moves through the geometry. The maximum distance to be traveled in each iteration depends on the body material. If it is a void region, no travel limit is applied; otherwise, the value of *DS* restricts the maximum distance to travel within the material (Lines 35 – 38). The maximum travel distance is constrained as it finds closer boundaries, avoiding computing distant bodies (Lines 40 – 50). Depending on the closest boundary, three possible cases must be considered, which determine the value of *travelType*:

- **0**: The particle cannot reach any boundary before the maximum travel distance. Therefore, the particle is moved, and the loop concludes (Lines 52 – 55).
- **1**: The particle crosses the current body boundary (Lines 56 – 70). If

the crossed body is the *world*, the particle escapes from the geometry system, and the function terminates. Otherwise, overlapping boundaries with outer bodies are examined to determine the final body where the particle crosses.

- **2:** The particle crosses a daughter body boundary (Lines 71 – 73). Overlapping boundaries with inner bodies are examined to determine the final crossed body.

Once the closest distance and the next body to cross are determined, the particle is moved to the corresponding point (Line 84) and the variables *nextBody* and *nextMat* are assigned with the body index where the particle has moved and its corresponding material respectively (Lines 86 – 102). If *nextMat* is 0, it indicates that the particle is moving into a void region. Consequently, the count of bodies crossed (*NCROSS*) must be incremented if the particle is not already in a void region in order to prevent double counting (Lines 86 – 90). If *nextMat* is not 0 and the particle is situated in a void region, it must be halted, and the loop concludes (Lines 91 – 93). If it is not in a void region and the initial particle material differs from *nextMat*, the particle must also be halted due to the material interface (Lines 99 – 102). However, if both materials are identical, the particle will continue only if the detector number of the bodies match (Lines 95 – 98). Assigning bodies as “detectors” can be done during the simulation configuration to force an interface between bodies even if they share the same material. This feature is used in some tallies and, by default, a detector index 0 is assigned to all bodies. Once the loop is completed, the output values are updated, and the *step* function concludes.

3.3. Geometry construction

To construct geometries for simulation with penRed, the mesh geometry files must follow the format described in the documentation. However, users do not need to create these files manually nor convert them from other format themselves. Instead, we have developed a Python plugin for Blender⁵ that facilitates the export of Blender-constructed geometries into the penRed format.

⁵<https://www.blender.org/>

For instance, Figure 4 depicts the Blender environment. In this case, the female phantom recently published by the International Commission on Radiological Protection (ICRP) in the ICRP145 [16] is imported into Blender, enabling the export of its geometry into the penRed format. This phantom has been chosen in this work because its high level of detail concerning the radiosensitive organs and tissues of the human body, and will be described in section 3.4.

In addition to harnessing Blender 3D environment and its versatile tools for constructing geometries, we can also leverage Blender ability to import a wide range of 3D mesh formats, including ABC, USD, OBJ, FBX, PLY, STL, and more. These imported meshes can then be exported to be used within penRed. The plugin itself, along with its documentation, is included in the penRed package for user convenience.

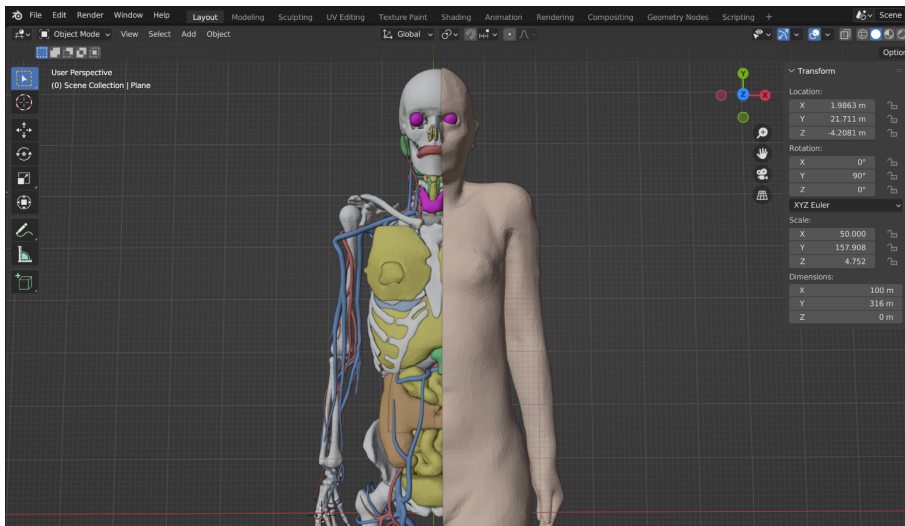


Figure 4: ICRP145 female phantom mesh edited with Blender.

3.4. Validation tests and benchmark

To validate our implementation, we first compared the simulations available in the penRed examples. These examples are adaptations of the PENELOPE [3] package and have been carried out using both quadric and triangular mesh surface geometries. For the sake of brevity, we will discuss only three examples in this work:

- The *1-disc* example, with and without variance reduction techniques.

The geometry of this example corresponds to a homogeneous disc phantom of Cu, with radius of 0.01 cm at plane XY and height of 0.005 cm at z axis with the base at $z = 0$ cm. The source is a point source of electrons, monoenergetic with energy of 40 keV located at $(x, y, z) = (0, 0, -0.0001)$ cm.

The quantities tallied in both versions of this example, are the cylindrical and spatial dose distribution, the energetic spectrum of emerging particles distribution, the energetic spectrum of particle fluence, the energy spectrum of particles impacting the disc, and the material energy deposition information. Notice that energy spectrums are normalized to the energy bin width.

The second version of this example, which incorporates variance reduction techniques, uses the same geometry as the first version and the same source configuration. In this scenario, interaction forcing, x-ray and bremsstrahlung splitting are activated. The configuration file specifies which body undergoes the variance reduction techniques (the disc phantom) and the type of particle and interaction to be forced-in, electrons in this case. In this version of the example, the number of histories of the simulation is reduced due to the applied splitting.

- The *3-detector-1* example features a geometry comprising a NaI cylindrical detector with a diameter and height of 5.08 cm, accompanied by a 1.27 cm Fe backing. Regarding the source configuration, this example is set up with a point-like Co-60 gamma-ray source emitting characteristic photons with equal probabilities of emission and energies of 1.17 and 1.33 MeV. The photons are directed to impinge on the NaI crystal from above. In this case, no variance reduction techniques are applied, and the tallied quantities include the total energy deposited in the detector material, the energy deposition spectrum registered by the NaI detector, as well as the energetic spectrum of emerging particles.
- The *4-x-ray-tube* example represents a simple x-ray generator. Its geometry includes a wolframium anode, an aluminium filter and a silicon detector, as it is shown in Figure 5. In this example, the source is configured as a monoenergetic electron beam of 150 keV directed to the anode to produce bremsstrahlung photons. Since the efficiency of the

photon production with this configuration is very low, variance reduction techniques are applied to increase the simulation efficiency forcing the photon production and splitting them. The simulation is configured to measure the energetic spectrum of particle fluence crossing the filter, the energy spectrums of particles impacting both, the filter and the detector, and the time of flight spectrum of impacting particles at the detector. Additionally, the energetic spectrum of emerging particles distribution and the energy deposition in all bodies and materials are tallied.

Some of the simulation parameters used for each example are summarized in the Table 1.

	Histories Number	Particle	Source E (keV)	Cutoffs (keV)		
				γ	e^-	e^+
<i>1-disc-noVR</i>	$1.4 \cdot 10^8$	e^-	40	1	1	1
<i>1-disc-VR</i>	$1.1 \cdot 10^7$	e^-	40	1	1	1
<i>3-detector</i>	$1.2 \cdot 10^8$	γ	$(1.17, 1.33) \cdot 10^3$	5	50	50
<i>4-x-ray-tube</i>	$4.1 \cdot 10^6$	e^-	150	10	10	10

Table 1: Summarized simulation parameters of the presented examples.

The process of adapting the examples, initially defined with the quadric geometry package, to be simulated using the surface mesh geometry package only affects the geometry definition. PenRed, being designed as a highly modular framework with automatic compatibility assurance among modules, allows seamless utilization of all tallies, variance reduction techniques, and other components for mesh simulations without any additional effort. Consequently, the only necessary modifications in the simulation configuration file are those related to the geometry configuration.

In addition, the geometry needs to be defined as a compilation of mesh surfaces following the penRed format. This process is streamlined through the use of the previously described Blender plugin. For instance, Figure 5 illustrates the construction of the example *4-x-ray-tube* in the Blender environment. Furthermore, the plugin can be used to convert standard mesh file formats to the penRed one, providing the flexibility for the user to create the geometry with its chosen CAD software.

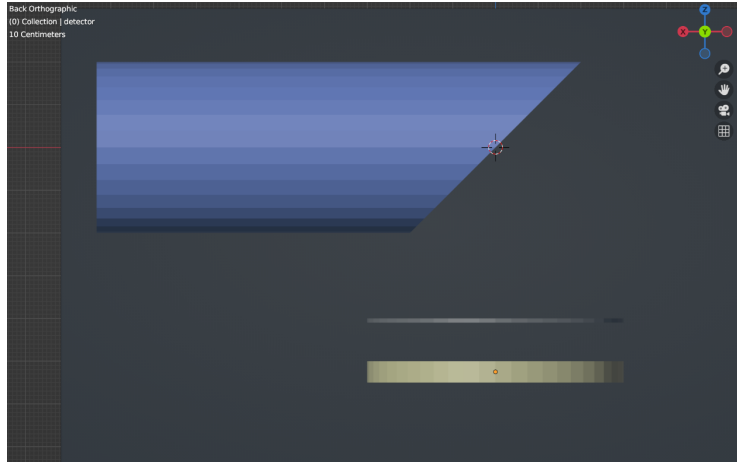


Figure 5: X-Ray tube example geometry constructed with Blender. The components shown, arranged from top to bottom, are as follows: wolframium anode (blue),aluminiumfilter(gray)andsilicondetector(yellow).

For more detailed information about each simulation, please refer to the penRed documentation. Furthermore, all the necessary files to run these simulations can be found in the penRed repository. Additionally, we adapted the ICRP145 phantom [16] with Blender to be simulated with penRed and compare the results with those provided using MCNP6. Specifically, we selected the simulation corresponding to the female phantom with the entire liver serving as a gamma source. The adult Mesh-type Reference Computational Phantoms (MRCs) provided by the ICRP, are considered as the most advanced type of computational phantoms which can be implemented directly into MC codes. The female MRC height and weight is in accordance with the reference values, 163 cm and 60 kg. This one is composed of 2.6 million triangular facets including all the radio sensitive organs and tissues relevant to dose calculations due to radiation exposure.

In terms of benchmarks, we repeated the phantom simulation while applying different optimization parameters to measure the performance improvements. All simulations, tests and benchmarks, were conducted using a single node equipped with an Intel(R) Core(TM) i9-10900K CPU running at 3.70GHz and with 64GB of RAM. The used optimizations are focused on minimize the amount of ray-triangle intersections checks. These ones are listed below:

- **Body tree:** As discussed before, the bodies conforming the geometry

follow a kinship hierarchy limiting the number of bodies that can be crossed by the particle.

- **Octrees:** Instead of testing all surface triangles belonging to a specific body individually, they are grouped into spatial regions defined by bounding boxes. Consequently, before initiating any ray-tracing check with a triangle in a given region, the algorithm ensures that the particle track intersects the corresponding boundary box. If not, it deduces that the track cannot cross any triangles within the tested region, leading to a significant reduction in the required computational time.

Furthermore, the regions containing the surface triangles can be further grouped into higher-level regions, creating a hierarchy of regions. In penRed, we have established three levels of regions. The topmost level consists of a single bounding box encompassing the entire object surface. The second level regions comprises a set of sub-regions, which, in turn, contain the triangles to be tested.

The subdivision of all geometry bodies into these three-level regions, or octrees, is automatically handled by penRed. However, users have the flexibility to adjust the sizes of different region levels, indicating the desired number of sub-elements contained in each one, to speed-up the simulation.

- **Triangle collision spheres:** Add a collision sphere to each triangle surrounding it. Before to apply the triangle-ray intersection algorithm, the distance between the track and the triangle center is calculated. If it is greater than the sphere radius the triangle is ignored.

As result, the whole geometry is subdivided in many levels, depending on the body tree structure, and three extra levels using the octrees in each body.

4. Results

4.1. Validation

The initial validation tests, which compared equivalent simulations using quadric and mesh-based geometries, demonstrate a high level of agreement between both geometry types. In Figure 6, we can observe the results for the 1-disc example. The top graph displays the energy spectrum of

the emerging electrons in the Z positive hemisphere, corresponding to the *ANGULAR_DET* tally, for the case with no variance reduction, whereas the bottom graph represents the energetic spectrum fluence, integrated across the entire disc volume, for the incoming particles, for the variance reduction case.

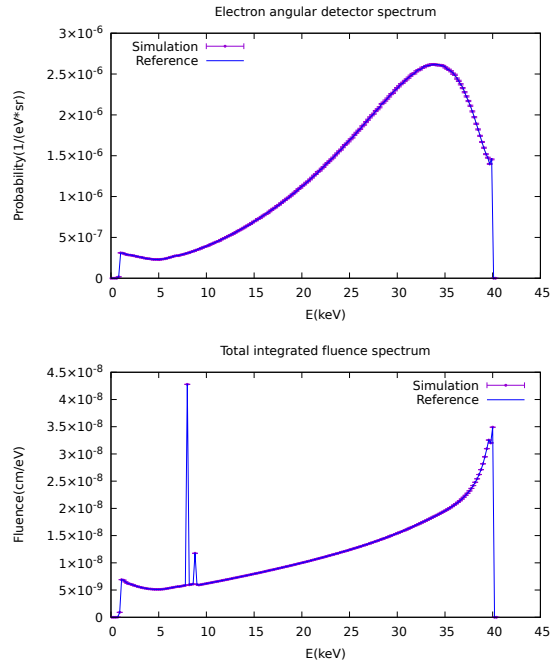


Figure 6: Results corresponding to the example *1-disc*. Energy spectrum of electrons escaping the geometry system upwards in Z direction with no variance reduction (top) and energy spectrum of fluence registered integrated across the entire disc volume, for the variance reduction case (bottom). All results have been calculated with both, quadric (Reference) and triangular mesh (Simulation) geometry types and are normalized to energy bin width.

Concerning the *detector* and *x-ray* examples, Figure 7 presents partial results. The top image illustrates the energy deposition spectrum recorded by the NaI detector, while the second image depicts the energy spectrum of the photons impacting the detector.

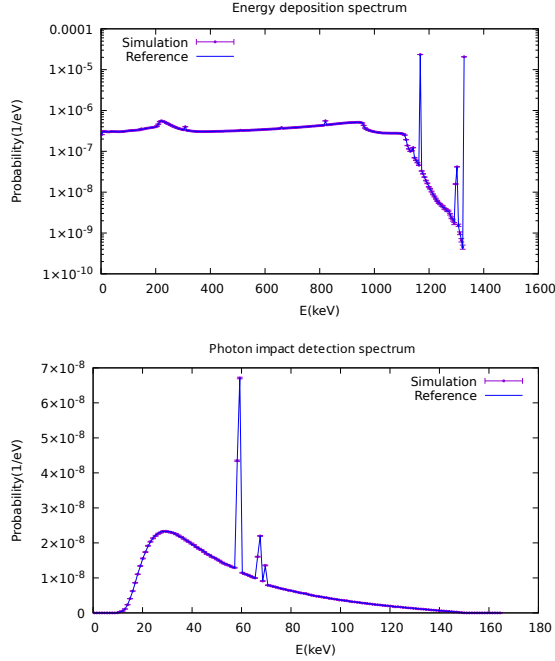


Figure 7: Results for the NaI detector and the x-ray tube examples. The top image corresponds to the energy deposition spectrum registered by the NaI detector, while the bottom one shows the energy spectrum of the photons impacting the silicon detector of the x-ray tube. All results have been calculated with both, quadric (Reference) and triangular mesh (Simulation) geometry types and are normalized to energy bin width.

The presented results clearly demonstrate a robust agreement between both geometry types. Furthermore, this behavior holds true for the results of all examples, including the omitted in this document for brevity.

To thoroughly validate this agreement, we conducted a detailed examination of the deviations between simulations, affirming the absence of significant systematic differences between both types of geometries. To reach this conclusion, we compared all results, bin by bin, between both simulations types by calculating the absolute bin difference (d_i) as defined in Eq. 1,

$$d_i = value_i^{quad} - value_i^{mesh} \quad (1)$$

where i represents the bin number, $value_i^{quad}$ denotes the value obtained for the i -th bin from the simulation with the quadric geometry, and $value_i^{mesh}$ is the corresponding value from the mesh geometry simulation. Additionally, we calculated the standard deviation (σ_i) associated with d_i using the Eq. 2,

$$\sigma_i = \sqrt{(\sigma_i^{quad})^2 + (\sigma_i^{mesh})^2} \quad (2)$$

where σ_i^{quad} and σ_i^{mesh} are the standard deviations of bin i obtained from the quadric and mesh simulations, respectively. Finally, the deviation d_i is converted to standard deviation units (q_i) as,

$$q_i = \frac{d_i}{\sigma_i} \quad (3)$$

An illustrative example is provided in Figure 8, where the value q_i has been represented for the energy spectrum of x-ray impacting photon (Figure 7, bottom). As depicted, the discrepancies between both simulations consistently remain below the 3σ and are evenly distributed around zero. This indicates that the possible systematic uncertainties introduced by differences between geometry and tracking models are not significant when compared to the statistical uncertainties inherent in the Monte Carlo simulation.

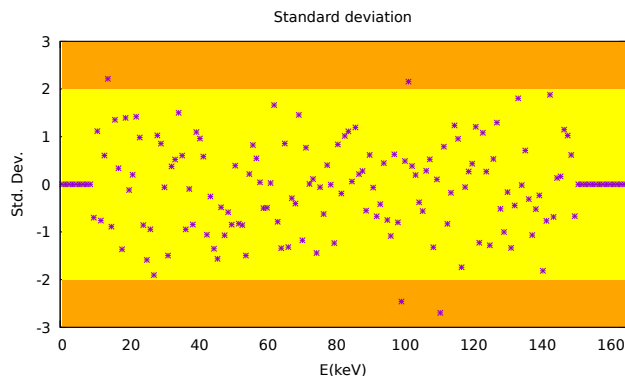


Figure 8: Differences between quadric and mesh simulations for the energy spectrum of impacted particles, measurement at the silicon detector, in the x-ray tube example. Differences are shown bin by bin in standard deviation units.

To conclude the validation process, we performed the phantom simulation employing identical simulation parameters to those disclosed by the ICRP, facilitating a direct comparison. The details of these parameters are outlined below. This specific example involves internal body irradiation, where the entire liver volume is designated as a monoenergetic gamma isotropic source with an emission energy of 1 MeV. The tracking cutoff for each particle type was established at 1 keV, meaning that any particle with energy below this

value is considered to be locally absorbed. The simulation was executed with a total of $1 \cdot 10^7$ histories. The MCNP6 results provided by the ICRP, measure the absorbed dose in each material. Therefore, for the purpose of comparison, the equivalent magnitude was tallied through a penRed simulation.

The total penRed simulation time, including the initialization and geometry pre-processing step, in this conditions was less than 8 hours with a total memory usage of 1.75 GB using 20 parallel threads. Notice that this memory usage does not correspond only to the memory required to store the geometry, but includes also the materials databases, tallies, source information and all the other data used by the program.

To avoid values with substantial fluctuations resulting from low statistical counts, we have focused only on bodies with a energy deposition greater than the 0.5% of the energy deposited in the source material ($1.51 \cdot 10^5$ eV per history). Therefore, only materials with an energy deposition exceeding 754.68 eV per history are considered. The summarized results are presented in table 2.

It is important to note that discrepancies may arise due many factors. First, both codes use different physics implementations and cross section databases, particularly concerning electron transport [20], especially for low-energy electrons [21] as well as the selection of multi-scatter parameters [22]. In addition, it should be acknowledged that the results provided by the ICRP145 phantom package were based on a unstructured volumetric mesh with tetrahedrals as volume elements. Therefore, mesh preprocessing for penRed and MCNP6 simulations differed. This discrepancy could introduce also type B uncertainties into the simulation, specially on complex and thin objects. Nevertheless, as shown in the table, the highest disparity observed in the measured energy deposition is only 3.2%, which is a more than reasonable value taking into account these considerations.

Body	MCNP6(eV/g)	penRed (eV/g)	Difference(%)
4300 Ribs cortical	2387.4 ± 9.0	2387.4 ± 9.0	0.00
4400 Ribs spongiosa	4044.2 ± 13.4	4052.4 ± 13.5	0.20
4900 Thoracic spine cortical	2848.3 ± 10.8	2887.7 ± 11.0	1.40
5000 Thoracic spine spongiosa	4440.7 ± 14.7	4411.7 ± 14.5	-0.65
5100 Lumbar spine cortical	1981.7 ± 9.0	2044.9 ± 9.0	3.20
5200 Lumbar spine spongiosa	3454.5 ± 12.8	3388.1 ± 12.5	-1.90
5600 Sternum spongiosa	774.6 ± 6.0	770.8 ± 6.0	-0.49
5700 Cartilage costal	1261.8 ± 7.6	1257.4 ± 7.5	-0.36
5800 Cartilage discs	1096.0 ± 7.0	1073.9 ± 7.0	-2.00
6200 Breast left adipose tissue	1000.4 ± 7.0	994.4 ± 7.0	-0.60
6400 Breast right adipose tissue	1787.6 ± 9.3	1786.5 ± 9.5	-0.06
6500 Breast right glandular tissue	1353.4 ± 8.3	1355.4 ± 8.5	0.15
7100 Gall bladder contents	2916.4 ± 12.2	2909.0 ± 12.5	-0.25
7200-7203 Stomach wall surface	3774.24 ± 13.5	3768.8 ± 13.5	-0.14
7300 Stomach contents	5040.9 ± 16.1	5032.9 ± 16.0	-0.16
7403 Small intestine wall surface	3980.0 ± 13.5	4002.3 ± 13.5	0.50
7602 Ascending colon wall surface	796.6 ± 6.0	785.9 ± 6.0	-1.40
8700 Heart wall	4617.6 ± 14.8	4601.9 ± 15.0	-0.34
8800 Blood in heart chamber	6291.5 ± 18.2	6257.2 ± 18.0	-0.54
8900 Kidney left cortex	1652.4 ± 8.8	1655.4 ± 9.0	0.18
9200 Kidney right cortex	3883.1 ± 14.0	3879.8 ± 14.0	-0.08
9300 Kidney right medulla	986.5 ± 6.9	979.8 ± 7.0	-0.68
9500 Liver	150940 ± 90	150984.0 ± 85	0.03
9700 Lung(AI) left	2696.0 ± 11.0	2695.9 ± 11.0	-0.014
9900 Lung(AI) right	9660 ± 22	9724.4 ± 22.0	0.66
11300 Pancreas	4535.7 ± 15.4	4530.3 ± 15.5	-0.12
12700 Spleen	1874.4 ± 9.6	1867.9 ± 9.5	-0.34

Table 2: Body energy deposition comparison between *MCNP6* and *penRed*.

4.2. Optimization

To test the impact of the previously discussed optimization techniques, several tests have been performed using the same hardware as the validation simulations. For the shake of brevity, only the tests performed for the MRCF female phantom are discussed following. Since we are not focusing on results accuracy, the particles cutoffs have been relaxed to increase the number of simulated histories per second and achieve a stable speed value with fewer

simulation time. These cutoffs have been fixed to a range of 0.5 cm for all particle types. A comparison of simulation speed, in histories per second, for different number of octree split size is shown in Table 3. On one hand, for each cell in the table, the first column indicates the number of objective three level regions in each second level region in the octree hierarchy. On the other hand, the first row assigns the objective number of triangles in each three level region in the octree. Although the program tries to restrict the number of inner elements to the specified sizes, it prioritizes to join regions with a high overlaps allowing to extend the number of inner elements at most twice the specified size. Therefore, the number of elements in each region can differ significantly. Moreover, as the phantom has many bodies, the region size values have been set globally for all geometry bodies. As these parameters can be set individually for each body, it is possible to tune up the configuration to achieve a better performance.

2nd\3rd	1000	200	100	50	20	10	5	2
10000	1177.0	8058.8	15375	15669	12036	10083	9254.8	7739.5
100	1165.2	8100.4	18535	25809	29876	29025	27969	26963
50	1174.9	8230.9	19401	28686	35401	35975	35214	34449
20	1188.4	8076.7	19739	31218	41002	43208	43580	42298
10	1168.9	8081.2	20054	31167	40459	41416	41408	39718

Table 3: Simulation speed in histories per second for different values of octree parameters. The top row indicate the objective number of triangles in each three level region. The left column specifies the objective number of three level regions in each second level one.

As we can see in Table 3, the simulation speed strongly depends on the chosen values of number of elements in each region level. Therefore, it is worth to perform short simulations with different parameter values to maximize the performance, specially on long simulations. Finally, to evaluate the impact of employing collision spheres for individual triangles, we conducted the same simulation using the optimal octree parameters, specifically, 20 inner regions within each outer region and 5 triangles within each inner region, but with the triangle collision sphere check disabled. The resulting simulation speed was 30486 histories per second. Consequently, utilizing this technique is advantageous, as it results in a 43% increase in simulation speed in this case.

5. Conclusions and future work

In this work, we have expanded the abilities of penRed to simulate on triangular mesh-based shapes. This was a missing feature not only in penRed but also in other PENELOPE physics-based software. This enhancement now enables penRed users to simulate and create organic shapes and complex designs using specialized tools like Blender. Thanks to the Blender ability to import different mesh formats, users have the flexibility to choose their preferred design environment. Additionally, the complete description of the internal penRed mesh format is provided in the documentation, making it straightforward to create a custom format converter if needed.

Our results demonstrate excellent agreement between simulations based on quadric and mesh-based geometries. Furthermore, we conducted simulations using the ICRP145 phantom, showing good agreement between the results provided in the phantom package and the penRed simulations, confirming the accuracy of our code. Moreover, this simulation case only requires 1.75 GB of memory to store not only the phantom data, but also the material, tallies and other required information.

We have also provided an algorithm description that allows users to implement various types of geometries, empowering them to customize or create their own geometric modules.

Additionally, our benchmark tests indicate that better performance is achieved with relatively small octree sizes. However, the optimal size might vary depending on the specific geometry being simulated. Therefore, we recommend conducting an initial benchmark to fine-tune settings for long-duration simulations.

Looking ahead, our future plans involve test other ray-triangle intersection algorithms and implementing the transport algorithm on GPUs to boost simulation speed for these types of geometries.

Acknowledgments

VG would like to acknowledge the “Generalitat Valenciana” (GVA), grant PROMETEO/2021/064. The authors extend their profound appreciation to Professor Vicent Giménez Gómez for his invaluable contributions to the planning and development of the penRed project. It is through his dedicated efforts that we are able to progress with the project.

References

- [1] EGSnrc: software tool to model radiation transport, <https://github.com/nrc-cnrc/EGSnrc>, accessed: 2017-07-2.
- [2] Los Alamos Scientific Laboratory. Group X-6., MCNP : a General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport. Los Alamos, N.M., Dept. of Energy, Los Alamos Scientific Laboratory (1979).
- [3] F. Salvat, PENELOPE. A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Issy-Les-Moulineaux: OECD Nuclear Energy Agency (2014).
- [4] GEANT4 Collaboration (Agostinelli. S. et al.), Geant4: A simulation toolkit, Nucl.Instrum.Meth. A506 250-303 SLAC-PUB-9350, FERMILAB-PUB-03-339 (2003).
- [5] H. Iwase, K. Niita, T. Nakamura, Development of general-purpose particle and heavy ion transport monte carlo code, Journal of Nuclear Science and Technology 39 (11) (2002) 1142–1151. arXiv:<https://doi.org/10.1080/18811248.2002.9715305>, doi:10.1080/18811248.2002.9715305.
URL <https://doi.org/10.1080/18811248.2002.9715305>
- [6] A. Ferrari, P. R. Sala, A. Fassò, J. Ranft, FLUKA: A multi-particle transport code (program version 2005), CERN Yellow Reports: Monographs, CERN, Geneva, 2005.
- [7] V. Giménez-Alventosa, V. Giménez Gómez, S. Oliver, PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE, Computer Physics Communications 267 (2021) 108065. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>.
- [8] S. Oliver, V. Giménez-Alventosa, F. Berumen, V. Gimenez, L. Beaulieu, F. Ballester, J. Vijande, Benchmark of the penred monte carlo framework for hdr brachytherapy, Zeitschrift für Medizinische Physik (2022). doi:<https://doi.org/10.1016/j.zemedi.2022.11.002>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0939388922001040>

- [9] P. P. Wilson, T. J. Tautges, J. A. Kraftcheck, B. M. Smith, D. L. Henderson, Acceleration techniques for the direct use of cad-based geometry in fusion neutronics analysis, *Fusion Engineering and Design* 85 (10) (2010) 1759–1765, proceedings of the Ninth International Symposium on Fusion Nuclear Technology. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.05.030>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920379610002425>
- [10] G4Tet.hh., [Online; accessed 28-July-2023]. URL <https://gitlab.cern.ch/geant4/geant4/-/blob/master/source/geometry/solids/specific/include/G4Tet.hh>.
- [11] M. C. Han, C. H. Kim, J. H. Jeong, Y. S. Yeom, S. Kim, P. P. H. Wilson, J. Apostolakis, Dagsolid: a new geant4 solid class for fast simulation in polygon-mesh geometry, *Physics in Medicine & Biology* 58 (13) (2013) 4595. doi:10.1088/0031-9155/58/13/4595. URL <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/58/13/4595>
- [12] F. B. Brown, R. Barrett, T. Booth, J. Bull, L. Cox, R. Forster, T. Goorley, R. Mosteller, S. Post, R. Prael, et al., Mcnp version 5, *Trans. Am. Nucl. Soc* 87 (273) (2002) 02–3935.
- [13] R. L. Martz, Mcnp6 unstructured mesh initial validation and performance results, *Nuclear Technology* 180 (3) (2012) 316–335. arXiv:<https://doi.org/10.13182/NT12-A15347>, doi:10.13182/NT12-A15347. URL <https://doi.org/10.13182/NT12-A15347>
- [14] A. Badal, I. Kyprianou, D. P. Banh, A. Badano, J. Sempau, pen-mesh—monte carlo radiation transport simulation in a triangle mesh geometry, *IEEE Transactions on Medical Imaging* 28 (12) (2009) 1894–1901. doi:10.1109/TMI.2009.2021615.
- [15] H. Luo, J. D. Baum, R. Löhner, A fast, matrix-free implicit method for compressible flows on unstructured grids, *Journal of Computational Physics* 146 (2) (1998) 664–690. doi:<https://doi.org/10.1006/jcph.1998.6076>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999198960764>

- [16] C.H. Kim, Y.S. Yeom, N. Petoussi-Henss, M. Zankl, W.E. Bolch, C. Lee, C. Choi, T.T. Nguyen, K. Eckerman, H.S. Kim, M.C. Han, R. Qiu, B.S. Chung, H. Han, B. Shin, Adult mesh-type reference computational phantoms. ICRP Publication 145. Ann. ICRP, ICRP 49 (3) (2020).
- [17] T. Möller, B. Trumbore, Fast, minimum storage ray/triangle intersection, in: ACM SIGGRAPH 2005 Courses, SIGGRAPH '05, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2005, p. 7–es. doi:10.1145/1198555.1198746. URL <https://doi.org/10.1145/1198555.1198746>
- [18] J. Havel, A. Herout, Yet faster ray-triangle intersection (using sse4), IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 16 (3) (2010) 434–438. doi:10.1109/TVCG.2009.73.
- [19] A. Kensler, P. Shirley, Optimizing ray-triangle intersection via automated search, in: 2006 IEEE Symposium on Interactive Ray Tracing, 2006, pp. 33–38. doi:10.1109/RT.2006.280212.
- [20] H. R. Sadoughi, S. Nasser, M. Momennezhad, H. R. Sadeghi, M. H. Bahreyni-Toosi, A comparison between gate and mcnpx monte carlo codes in simulation of medical linear accelerator, J Med Signals Sens 4 (1) (2014) 10–7.
- [21] C. Valdes-Cortez, I. Mansour, M. J. Rivard, F. Ballester, E. Mainegra-Hing, R. M. Thomson, J. Vijande, A study of type b uncertainties associated with the photoelectric effect in low-energy monte carlo simulations, Physics in Medicine & Biology 66 (10) (2021) 105014. doi:10.1088/1361-6560/abebfd. URL <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6560/abebfd>
- [22] J. P. Archambault, E. Mainegra-Hing, Comparison between egsrc, geant4, mcnpx5 and penelope for mono-energetic electron beams, Physics in Medicine & Biology 60 (13) (2015) 4951. doi:10.1088/0031-9155/60/13/4951. URL <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/60/13/4951>

Appendix A. *Step* code

Algorithm 1 Step algorithm

Input: State, DS, bodies, world

Output: State, DSEF, DSTOT, NCROSS

```
1:  $DSEF \leftarrow 0$ 
2:  $DSTOT \leftarrow 0$ 
3:  $NCROSS \leftarrow 0$ 
4: if  $State.IBODY \geq bodies.size$  then    ▷ Means the particle is outside
    the geometry
5:   if  $State$  can cross  $world$  then
6:      $ds2In \leftarrow State.distance(world)$ 
7:      $State.IBODY \leftarrow world.index$ 
8:      $State.MAT \leftarrow world.MAT$ 
9:      $DSTOT \leftarrow ds2In$ 
10:     $NCROSS \leftarrow 1$ 
11:     $State.move(ds2In)$ 
12:    if  $world.MAT$  is not 0 then    ▷ The world is not a void region
13:       $DSEF \leftarrow ds2In$ 
14:    end function
15:  end if
16: else    ▷ The particles does not reach the geometry
17:    $State.IBODY \leftarrow bodies.size$ 
18:    $State.MAT \leftarrow 0$ 
19:    $DSEF \leftarrow \infty$ 
20:    $DSTOT \leftarrow \infty$ 
21:    $State.move(\infty)$ 
22:  end function
23: end if
24: end if
25:    ▷ At this point, the particle is inside the geometry system
26:  $isInVoid \leftarrow false$     ▷ Flag if it is in a void region
27: if  $State.MAT$  is 0 then
28:    $isInVoid \leftarrow true$ 
29: end if
30:  $nextMat \leftarrow State.MAT$ 
31:  $nextBody \leftarrow State.IBODY$ 
```

```

32: while true do
33:   currentBody  $\leftarrow$  nextBody
34:   body  $\leftarrow$  bodies[currentBody]
35:   travel  $\leftarrow$  DS  $\triangleright$  Set the maximum distance to travel in this iteration
36:   if nextMat is 0 then
37:     travel  $\leftarrow$   $\infty$ 
38:   end if
39:   travelType  $\leftarrow$  0  $\triangleright$  Flag travel inside the actual body
40:   if State can cross body before travel then
41:     travelType  $\leftarrow$  1  $\triangleright$  Flag travel crossing body boundary
42:     travel  $\leftarrow$  State.distance(body)  $\triangleright$  Update maximum travel
distance
43:     nextBody  $\leftarrow$  body.parent
44:   end if
45:   for each daughter  $\in$  body.daughters do
46:     if State can cross daughter before travel then
47:       travelType  $\leftarrow$  2  $\triangleright$  Flag travel crossing daughter boundary
48:       travel  $\leftarrow$  State.distance(daughter)
49:       nextBody  $\leftarrow$  daughter.index
50:     end if
51:   end for
52:   if travelType is 0 then  $\triangleright$  Particle remains in actual body
53:     DSEF  $\leftarrow$  DSEF + travel
54:     State.move(travel)
55:     break  $\triangleright$  Stop loop
56:   else if travelType is 1 then  $\triangleright$  Crosses body boundary
57:     if currentBody is world.index then  $\triangleright$  Escapes from geometry
58:       State.IBODY  $\leftarrow$  bodies.size
59:       if State.MAT is 0 then
60:         DSEF  $\leftarrow$   $\infty$ 
61:       else if nextMAT is not 0 then
62:         DSEF  $\leftarrow$  DSEF + travel
63:       end if
64:       State.MAT  $\leftarrow$  0
65:       DSTOT  $\leftarrow$   $\infty$ 
66:       NCROSS  $\leftarrow$  NCROSS + 1
67:       State.move( $\infty$ )
68:     end function
69:   end if

```

```

70:   solveOverlapsUp(travel,State,currentBody,nextBody)
71:   else
72:     solveOverlapsDown(travel,State,nextBody,nextBody)
73:   end if
74:   if nextMat is 0 then
75:     if State.MAT is 0 then
76:        $DSEF \leftarrow DSEF + travel$ 
77:     else
78:        $DSTOT \leftarrow DSTOT + travel$ 
79:     end if
80:   else
81:      $DSEF \leftarrow DSEF + travel$ 
82:      $DS \leftarrow DS - travel$ 
83:   end if
84:   State.move(travel)
85:   nextMat  $\leftarrow$  bodies[nextBody].MAT
86:   if nextMat is 0 then
87:     if not inVoid then  $\triangleright$  Count void region cross only once
88:        $NCROSS \leftarrow NCROSS + 1$ 
89:       inVoid  $\leftarrow$  true
90:     end if
91:   else if inVoid then  $\triangleright$  Void to material cross. Stop it.
92:      $NCROSS \leftarrow NCROSS + 1$ 
93:     break
94:   else if nextMat is State.MAT then  $\triangleright$  No material change
95:     if bodies[nextBody].KDET is not body.KDET then
96:        $NCROSS \leftarrow NCROSS + 1$ 
97:       break  $\triangleright$  Stop on detector change
98:     end if
99:   else  $\triangleright$  Material changed, stop moving
100:      $NCROSS \leftarrow NCROSS + 1$ 
101:     break
102:   end if
103: end while
104:  $DSTOT \leftarrow DSTOT + DSEF$ 
105: State.MAT  $\leftarrow$  nextMat
106: State.IBODY  $\leftarrow$  nextBody

```

Capítol III

Conclusions i treball futur.

Tal i com s'ha explicat a la Secció I.1, els treballs s'han centrat en desenvolupar diferents eines computacionals. Aquestes es basen en tècniques MC aplicades al camp de la física mèdica i ofereixen solucions als problemes plantejats en els objectius.

En primer lloc, les eines IAEA2MCNP i MCNP2IAEA, ofereixen a la comunitat científica, especialment usuària de MCNP6, un programa extern i validat que es capaç de convertir PSF en format estàndard de la IAEA al format específic de MCNP6 i viceversa. La manca d'aquesta capacitat en el paquet original de MCNP6, dificulta la comparació de resultats amb altres grups d'investigació, la qual cosa limita les capacitats de reproductibilitat del codi i la seua idoneïtat per a ser emprat en estudis de comparació. A més, la majoria de fabricants de maquinari, especialment mèdic, proporcionen els espectres d'eixida en un PSF en el format de la IAEA, per evitar així compartir detalls sobre la geometria i materials dels equips, segons acords de confidencialitat. Sense aquesta eina, la comunitat usuària de MCNP6 no podia emprar directament aquests PSFs, sent un desavantatge front a altres codis de MC. Concloent, les eines desenvolupades, han millorat l'àmbit d'ús de MCNP6, dins del camp de la física mèdica, i la reproductibilitat dels seus resultats.

Cal assenyalar que, tot i que les verificacions dutes a terme en el treball presentat s'han realitzat en aplicacions de radioteràpia de feix extern amb LinAcs, les eines són independents de l'aplicació i es poden emprar sense restriccions en qualsevol arxiu PSF proporcionat per la IAEA o MCNP6.

El segon treball, es va dur a terme en col·laboració amb la Universitat de València i l'Hospital Universitari i Politècnic La Fe. En aquest, s'ha dissenyat un disseny d'un filtre aplanador per tal d'homogeneïtzar el feix de 12 MeV de l'accelerador de radioteràpia intra-operatòria LIAC HWL, quan aquest es configura amb un aplicador de 10 cm de diàmetre.

Per al seu disseny, s'han dut a terme simulacions de MC per estudiar la distribució de dosi i la uniformitat del feix, les quals s'han realitzat amb dos codis diferents i en dos grups de recerca independents. Més encara, el disseny del filtre s'ha verificat experimentalment, una vegada construït amb una impressora 3D. Les validacions dutes a terme amb el filtre col·locat en l'aplicador, ha conclòs que la uniformitat del feix va passar a ser d'un 1.6%, quan en la configuració original era del 5.9%. S'ha verificat també que afegir el filtre no augmenta la dosi perifèrica significativament (menys d'un 2.6% i dins del valor màxim proporcionat pel fabricant), per tant es pot emprar en les mateixes sales que el LIAC amb l'aplicador sense filtre. Finalment, l'estudi de l'impacte en el feix clínic amb el filtre mostra una reducció de la dosi del 16% i una disminució en 1.1 mm en la dosi al 50% del màxim de la PDD, en comparació amb la configuració original. Aquests fets s'hauran de considerar per a usos futurs d'aquesta nova configuració del LIAC en la pràctica clínica. En el cas de les simula-

cions realitzades amb MCNP6 en aquest treball, s'ha fet ús directe del resultat del primer, concretament de l'eina de conversió IAEA2MCNP. Aquesta eina ha permès convertir el PSF proporcionat pels fabricants del LIAC HWL, de la marca Sordina, a format MCNP6. Aquest fet, fa palès dels avantatges llistats del fet de tindre un convertidor a format estàndard de la IAEA, el que ha permès participar en aquest treball.

Aprofitant els beneficis dels PSFs, al tercer treball, s'ha desenvolupat una eina per generar PSFs, de forma ràpida, que caracteritzen el feix a l'eixida del LinAc, segons les possibles configuracions d'aquest. Donat totes les possibles combinacions del MLC, esta eina és capaç de reduir el temps de còmput de simulació entre un 61% i un 68%, segons el cas. La viabilitat de la metodologia de generació de feixos, s'ha estudiat en dos casos senzills, camp quadrat de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a una SSD = 100 cm, i camp amb forma de rombe circumscrit en aquest camp quadrat. A més, es va estudiar també en un escenari simplificat d'un tractament real de radioteràpia de pròstata, irradiant el maniquí MRCP de la ICRP145, amb tres feixos conformats per a tres orientacions del braç del LinAc. En les comparacions entre simulacions en les que s'han emprat els PSFs generats, i la simulació completa de la geometria, s'ha conclòs que els resultats de dosi són estadísticament compatibles. En el cas clínic, les diferències de dosi entre simulacions amb PSFs generats i de referència, són de l'1.1 % per a la pròstata i inferiors al 2.5% per als òrgans circumdants estudiats. Tot i que s'ha presentat el cas d'irradiació de pròstata amb un feix de fotons de 6 MeV per a una conformació de feix cobrint aquest objectiu, el mètode pot estendre's per a diferents tractaments amb diferents formes de feix. El treball presenta aleshores, una solució eficient i precisa per a generar PSFs en planificacions de MC de LinAcs, estalviant la necessitat de simular repetidament la geometria del MLC, així com la geometria completa del LinAc. Aquesta metodologia permet, no sols estalviar temps de còmput, sinó que simplifica la configuració de les simulacions, ja que no s'ha de modelitzar el dispositiu. Tenint en compte estes característiques, la planificació de tractaments amb simulació MC, podria estendre's com una opció viable en la clínica. Cal remarcar que, gràcies a les eines desenvolupades al primer treball, els PSFs generats poden emprar-se en diferents codis de MC.

Finalment, en l'últim treball que conforma aquesta tesi, i donats els avantatges de la incorporació de simular sobre geometries mallades vista en treballs anteriors, s'han ampliat les funcionalitats de penRed per ser capaç de simular sobre geometries basades en malles triangulars. Esta capacitat mancava no sols en penRed, sinó també en altres programes basats en la física de PENELOPE. Aquest fet impedia que, en dita família de codis, es pogueren emprar fitxers proporcionats per fabricants o per organitzacions, com el cas del MRCP de la ICRP. La funcionalitat implementada, permet als usuaris de penRed simular i crear formes orgàniques i dissenys complexos emprant eines especialitzades, com Blender, ja que s'ha implementat també un plug-in integrat en Blender que simplifica la seua creació. A més, donada la capacitat de Blender per importar diferents formats de malles, els usuaris tenen la flexibilitat d'escollir entre un gran nombre d'entorns de disseny i formats. No obstant, la descripció completa del format intern de malla de penRed es proporciona en la seua documentació, la qual cosa, facilita la creació d'un convertidors entre formats específics si fos necessari.

Els resultats d'aquest treball mostren una excel·lent concordança entre les simulacions basades en geometries quàdriques i en malles per a tots els exemples que s'han simulat, pel que es pot concloure que la implementació del mètode funciona correctament. A més, s'han realitzat verificacions simulant amb penRed un cas de tractament sobre el maniquí MRCP, donats els seus avantatges en quan a la definició d'òrgans i teixits. Els resultats de dosi obtinguts, s'han comparat amb els de MCNP6 proporcionats per la mateixa ICRP.

Aquesta comparació ha mostrat resultats estadísticament compatibles confirmant la correcta implementació de l'algorisme implementat. Cal destacar, que en el cas de la simulació del maniquí MRCP, aquesta ha requerit únicament 1.75 GB de memòria per emmagatzemar, no sols les dades del maniquí, sinó també els materials i tota la informació requerida per a la simulació.

El mòdul implementat, permet que penRed es pugui emprar per a simulacions en les que la geometria ve donada en format CAD, el que estalvia incórrer en possibles errors durant la construcció de geometries. A més, permet que el codi es pugui emprar en estudis de comparació amb altres grups de recerca. Aquesta característica facilita que penRed pugui ser utilitzat per a simulacions com les que s'han vist en els treballs anteriors, on les geometries dels dispositius s'ha definit utilitzant malles. Més encara, donades les característiques específiques de penRed per al seu ús en física mèdica, la seua optimització i menor ús de memòria, respecte a altres codis, el treball desenvolupat fa de penRed un candidat idoni per a aquest tipus de simulacions.

En conclusió, tots els treballs presentats, proporcionen una millora en la metodologia i eines computacionals disponibles en la comunitat científica, en l'àmbit de les simulacions MC aplicades a física mèdica. Tot i que en la tesi, s'ha focalitzat en l'aplicació a radioteràpia i planificació d'aquests tractaments, cal destacar que els desenvolupaments realitzats són genèrics. Estos, poden emprar-se tant en altres àmbits com, dins de la física mèdica, en tractaments de protonteràpia, o en diagnòstic. Per exemple en simulacions de TC, o altres dispositius mèdics. De fet, com a treball futur, es pretén desenvolupar eines específiques per a la part de diagnòstic, ja que és una part fonamental per a qualsevol tipus de tractament de radioteràpia. Els desenvolupaments futurs que es volen plantejar, es faran dins de l'entorn de penRed degut a que es de codi obert, i per tant més accessible a la comunitat, i pels avantatges que ja s'han discutit al llarg d'aquest document. A més, es mantenen obertes les col·laboracions relacionades amb l'estudi de tractaments d'IOERT. Actualment, s'està treballant en el desenvolupament de blindatges de protecció de la pell, que milloren la cicatrització en irradiacions amb diferents energies. D'altra banda, a partir de l'estudi dut a terme en quan als PSFs, la metodologia presentada, es pot incloure directament en un planificador. Per aconseguir-ho s'ha de conèixer el format d'entrada i eixida per tal d'adaptar-lo al codi MC. Açò, està previst implementar-se en un planificador lliure d'ús acadèmic i de recerca com és el PLUNC. Més encara, la generació de PSFs, pot emprar-se també per a generar fitxers en tractaments amb protons. En aquesta modalitat, el feix és molt més complex, ja que involucra un major nombre de partícules secundàries, ja siguen els neutrons, fotons o electrons. A més, el programari desenvolupat en el que a aquest àmbit respecta, també constitueix les bases per poder mostrear qualsevol variables present en el PSF, per a diferents propòsits.

Capítol IV

Programari i publicacions.

A la present secció, es llistaran els resultats obtinguts durant el desenvolupament de la tesi, tant el programari desenvolupat, com les publicacions en revistes científiques, congressos i premis.

IV.1 Programari desenvolupat.

Com a resultat del primer treball de la recerca bibliogràfica descrita en aquesta tesi, s'ha registrat el següent programari.

- *IAEA2MCNP and MCNP2IAEA Phase Space File (PSF) conversor.*

Aquest registre s'ha realitzat a través del *Servei de Promoció i Recolzament a la Investigació, la Innovació i la Transferència de la Universitat Politècnica de València*.

A més, està en vies de tramitació la incorporació d'aquest codi a l'Agència d'Energia Nuclear NEA.

IV.2 Publicacions en revistes científiques indexades.

En aquesta secció, es mostraran les publicacions desenvolupades al llarg d'aquesta tesi, incloent les aportades com a tronc de la mateixa i altres dins del camp de la física mèdica.

1. V. Giménez-Alventosa, V. Giménez Gómez, **S. Oliver**. *PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE*. Computer Physics Communications, 267 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>
2. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Toolkit implementation to exchange phase-space files between IAEA and MCNP6 monte Carlo code format*. International Journal of Radiation Biology, 99 (3), pp.373-383 (2023)
<https://doi.org/10.1080/09553002.2022.2110296>
3. **S. Oliver**, J. Vijande, N. Tejedor-Aguilar, R. Miró, Juan J. Rovira-Escutia, F. Ballester, B. Juste, V. Carmona, G. Felici, G. Verdú, E. Sanchis, A. Conde, J. Pérez-Calatayud. *Monte Carlo flattening filter design to high energy intraoperative electron beam homogenization*. Radiation Physics and Chemistry, 212 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2023.111102>

4. **S. Oliver**, S. Morató, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, N. Tejedor, J. Pérez-Calatayud. *MLEM Neutron Spectra Unfolding in a Radiotherapy Bunker Using Bonner Sphere Spectrometer*. Nuclear Science and Engineering, (2023).
<https://doi.org/10.1080/00295639.2023.2192312>
5. **S. Oliver**, V. Giménez-Alventosa, F. Berumen, V. Giménez, L. Beaulieu, F. Ballester, J. Vijande. *Benchmark of the PenRed Monte Carlo framework for HDR brachytherapy*. Zeitschrift für Medizinische Physik, 33 (4), pp.511-528 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.zemedi.2022.11.002>
6. **S. Oliver**, S. Rodriguez Bosca, V. Giménez-Alventosa *Enabling Particle Transport on CAD-Based Geometries for Radiation Simulations with penRed*. Computer Physics Communications (298), (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2024.109091>

IV.3 Contribucions a congressos.

IV.3.1 Congressos internacionals.

1. **S. Oliver**, V. Giménez-Alventosa, M. Chillarón, V. Vidal, G. Verdú. *Radiation dose estimation study for sparse-view CT: Monte-Carlo simulation*. 15th International Symposium on Radiation Physics (ISRP-15), Online (2021).
2. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, J. Vijande, F. Ballester, N. Tejedor, J. Pérez-Calatayud. *Flattening filter design for intraoperative radiotherapy with 12 MeV electron beam with large applicators using Monte-Carlo simulations*. 15th International Symposium on Radiation Physics (ISRP-15), Online (2021).
3. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *A converter tool between IAEA and MCNP6 phase-space files format and use cases developed at the UPV*. 2021 MCNP® User Symposium, 1-12, Online (2021).
4. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Methodology for phase space file computational generation for Monte Carlo simulations at the exit of a medical Linear Accelerator*. 14th International Conference on Radiation Shielding (ICRS 14) and 21st Topical Meeting of the Radiation Protection and Shielding Division (RPSD 2022), 518 - 520. Seattle, USA: American Nuclear Society (2022).
5. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *MLEM neutron spectra unfolding for radiotherapy photon beams using Bonner Sphere Spectrometer*. 14th International Conference on Radiation Shielding (ICRS 14) and 21st Topical Meeting of the Radiation Protection and Shielding Division (RPSD 2022), 230-233. Seattle, USA: American Nuclear Society (2022).
6. **S. Oliver**, J. Cases, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Determination of organ doses in thyroid treatments with I- 131 by Monte Carlo simulation*. 1th International Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement Applications (IRRMA 11), 48. Bologna, Italy: Fondazione Bologna University Press (2023).

7. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Maximum-Likelihood Expectation-Maximization method applied to unfold neutron spectra in a radiotherapy bunker*. Mathematical Modelling in Engineering & Human Behaviour 2023 (MME&HB 2023). València, Spain (2023).
8. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Potential Medical Applications of Monte Carlo Code MCNP6.2 using the Adult Mesh-Type Reference Computational Phantoms from ICRP Publication 145*. 3rd Annual 2023 MCNP® User Symposium. Online (2023).
9. V. Ribes, **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Dose distribution calculation in treatments with Lu-177 using Monte Carlo simulation*. 4th International Conference on Dosimetry and its Applications (ICDA-4). València, Spain (2023).
10. A. Díaz, **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Brachytherapy planning system based on Monte Carlo simulation with MCNP6*. 4th International Conference on Dosimetry and its Applications (ICDA-4). València, Spain (2023).
11. V. Giménez-Alventosa, **S. Oliver**. *Extensions of penRed for computed tomography simulation and brachytherapy treatments*. 4th International Conference on Dosimetry and its Applications (ICDA-4). València, Spain (2023).

IV.3.2 Congressos nacionals.

1. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Herramienta para la conversión de espacios de fase de la IAEA al formato de entrada de MCNP*. Reunión Virtual de la Sociedad Nuclear Española, Online 1-6 (2020).
2. V. Giménez-Alventosa, V. Giménez Gómez, **S. Oliver**. *PenRed: Un motor de Monte-Carlo extensible y paralelo para el transporte de radiación basado en PENELOPE*. 7º Congreso Conjunto Sociedad Española de Física Médica y Sociedad Española de Protección Radiológica (23 SEFM - 18 SEPR), Online (2021).
3. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Método para la generación computacional de espacios de fases a la salida de LinAcs*. 7º Congreso Conjunto Sociedad Española de Física Médica y Sociedad Española de Protección Radiológica (23 SEFM - 18 SEPR), Online (2021).
4. **S. Oliver**, V. Giménez-Alventosa, M. Chillarón, V. Vidal, G. Verdú. *Estudio de estimación de dosis de radiación para TC de pocas vistas: simulación de Monte-Carlo*. 46ª Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Granada, España (2021).
5. **S. Oliver**, P. Calero, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, N. Tejedor, J. Pérez-Calatayud. *Aplicación de simulaciones Monte Carlo para obtener los coeficientes de calibración de una cámara de ionización utilizada en tratamientos de radioterapia intraoperatoria*. 46ª Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Granada, España (2021).
6. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, J. Vijande, F. Ballester, N. Tejedor, J. Pérez-Calatayud. *Diseño de un filtro aplanador para haces de 12 MV usados en tratamientos de radioterapia intraoperatoria*. 46ª Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Granada, España (2021).

7. **S. Oliver**, S. Morató, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, N. Tejedor, J. Pérez-Calatayud. *Simulaciones Monte-Carlo para Reconstrucción de Espectros de Neutrones en Una Sala de Radioterapia Utilizando BSS*. 47^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Cartagena, España (2022).
8. J. Cases, **S. Oliver**, S. Morató, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Estudio y Determinación de Dosis en Órganos en Tratamientos de Tiroides con Yodo Radioactivo Mediante Simulación Monte Carlo*. 47^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Cartagena, España (2022).
9. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Generación Computacional de Espacios de Fase a la Salida del MLC de Un Linac para Simulación Monte-Carlo*. 47^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Cartagena, España (2022).
10. **S. Oliver**, V. Giménez-Alventosa, M. Chillarón, V. Vidal, G. Verdú, F. Ballester, J. Vijande. *Extensiones de Penred para la simulación de tomografía computerizada y tratamientos de braquiterapia*. 8^o Congreso Conjunto Sociedad Española de Física Médica y Sociedad Española de Protección Radiológica (24 SEFM - 19 SEPR). Oviedo, España (2023).
11. **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Diseño y validación de una metodología para generar espacios de fases de haces conformados a la salida del colimador multiláminas de un LinAc*. 8^o Congreso Conjunto Sociedad Española de Física Médica y Sociedad Española de Protección Radiológica (24 SEFM - 19 SEPR). Oviedo, España (2023).
12. V. Ribes, **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Estudio de la Distribución de Dosis en Tratamientos con Lu-177 Mediante Simulación Monte Carlo*. 48^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Toledo, España (2023).
13. A. Díaz, **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró, G. Verdú. *Sistema de Planificación en Braquiterapia basado en Simulaciones Monte Carlo con MCNP6*. 48^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Toledo, España (2023).
14. J. José García, **S. Oliver**, B. Juste, R. Miró. *Estudio del Cabezal de Una Máquina de Protonterapia Mediante el Método Monte Carlo*. 48^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Toledo, España (2023).

IV.4 Premis d'investigació.

1. Premi a la Millor Ponència en: *Área de Medicina y Salud en el Ámbito Nuclear* de la 47^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española, pel treball *Generación Computacional de Espacios de Fase a la Salida del MLC de Un Linac para Simulación Monte-Carlo*. Entitat: Sociedad Nuclear Española (2022)
2. Premi Millor Comunicació Pòster SEFM en: *8^o Congreso Conjunto Sociedad Española de Física Médica y Sociedad Española de Protección Radiológica (24 SEFM - 19 SEPR)*, pel treball *Extensiones de Penred para la simulación de tomografía computerizada y tratamientos de braquiterapia*. Entitat: Sociedad Española de Física Médica (2023)

3. Premi a la Millor Ponència en: *Área de Medicina Nuclear y Protección Radiológica de la 48^a Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española*, pel treball: *Estudio de la Distribución de Dosis en Tratamientos con Lu-177 Mediante Simulación Monte Carlo*. Entitat: Sociedad Nuclear Española (2023)

Bibliografia

- [1] Mettler FA, Huda W, Yoshizumi TT, et al., Effective doses in radiology and diagnostic nuclear medicine: a catalog., *Radiology* 248 (2008) 254–263.
- [2] OECD, Computed tomography (ct) exams (2018). doi:<https://doi.org/https://doi.org/10.1787/3c994537-en>.
URL <https://www.oecd-ilibrary.org/content/data/3c994537-en>
- [3] Smith-Bindman R, Miglioretti DL, Johnson E, et al., Use of diagnostic imaging studies and associated radiation exposure for patients enrolled in large integrated health care systems, 1996-2010., *JAMA* 307 (2012) 2400–2409.
- [4] Pola A, Corbella D, Righini A, et al, Computed tomography use in a large Italian region: trend analysis 2004-2014 of emergency and outpatient CT examinations in children and adults., *Eur Radiol* 6 (2008) 2308.
- [5] F. A. Mettler Jr., B. R. Thomadsen, M. Bhargavan, D. B. Gilley, J. E. Gray, J. A. Lipoti, J. McCrohan, T. T. Yoshizumi, M. Mahesh, Medical radiation exposure in the u.s. in 2006: Preliminary results, *Health Physics* 95 (5) (2008).
URL https://journals.lww.com/health-physics/fulltext/2008/11000/medical_radiation_exposure_in_the_u_s__in_2006_.6.aspx
- [6] A. C. Kak, M. Slaney, Principles of Computerized Tomographic Imaging, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.
- [7] Yu-Hsuan Shao, Kevin Tsai, Sinae Kim, et al., Exposure to Tomographic Scans and Cancer Risks., *JNCI Cancer Spectrum* 4 (2020).
- [8] Instituto nacional del cáncer, <https://www.cancer.gov/espanol/cancer/naturaleza/estadisticas>, accessed: 2022-09-22.
- [9] Eurostat, Causes of death statistics, *Statistics Explained*, 2020.
- [10] Codeocean, <https://ecis.jrc.ec.europa.eu/>, accessed: 2022-08-16.
- [11] Lievens, Y., Borrás, J. M., Grau, C., Provision and use of radiotherapy in Europe., *Molecular oncology* 14 (2020) 1461–1469.
- [12] E. Podgorsak, Treatment machines for external beam radiotherapy., International Atomic Energy Agency (IAEA), 2005.
- [13] T. X, L. K, H. Y, C. J, Z. J., The evolution of proton beam therapy: Current and future status., *Mol Clin Oncol.* 8 (1) (2018) 15–21.

- [14] A. Bishop, B. Greenfield, A. Mahajan, A. Paulino, M. Okcu, P. Allen, M. Chintagumpala, L. Kahalley, M. F. Mcaleer, S. MCGovern, W. Whitehead, D. Grosshans, Proton beam therapy versus conformal photon radiation therapy for childhood craniopharyngioma: Multi-institutional analysis of outcomes, cyst dynamics, and toxicity, *International Journal of Radiation Oncology*Biography*Physics* 90 (10 2014). doi:10.1016/j.ijrobp.2014.05.051.
- [15] F. A. Calvo, Intraoperative irradiation: precision medicine for quality cancer control promotion, *Radiation Oncology* 12 (1) (2017) 1–5.
- [16] A. Pilar, M. Gupta and S. Laskar., Intraoperative radiotherapy: review of techniques and results., *Ecancermedicallscience* (2017) 750.
- [17] F. A. Calvo, Intraoperative irradiation: Precision medicine for quality cancer control promotion., *Radiat. Oncol.* 12 (2017) 1–5.
- [18] E. Sanchis, S. Casans, G. Felici, R. García-Gil, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, M. J. Pérez-Calatayud, J. Pérez-Calatayud, Detector for monitoring potential bleeding during electron intraoperative radiotherapy, *Physica Medica* 57 (2019) 95–99.
- [19] Liac hwl mobile ioert accelerator, Online, available: <https://www.soiort.com/products/liachwl/>.
- [20] A. Rosi, V. Viti, Guidelines for quality assurance in intra-operative radiation therapy, *Oncología (Barcelona)* 27 (07 2004). doi:10.4321/S0378-48352004000700013.
- [21] S. Bisello, S. Cilla, A. Benini, R. Cardano, N. Nguyen, F. Deodato, G. Macchia, M. Buwenge, S. Cammelli, T. Wondemagegnehu, A. Uddin, S. Rizzo, A. Bazzocchi, L. Strigari, A. Morganti, Dose-volume constraints for organs at risk in radiotherapy (corsair): An "all-in-one" multicenter-multidisciplinary practical summary, *Curr Oncol* 29 (10) (2022) 7021–7050. doi:10.3390/currenco129100552.
- [22] I. A. E. Agency, Accuracy requirements and uncertainties in radiation therapy, no. 31 in IAEA human health series, International Atomic Energy Agency, Vienna, 2016, includes bibliographical references.
- [23] T. Knöös, E. Wieslander, L. Cozzi, C. Brink, A. Fogliata, D. Albers, H. Nyström, S. Lassen, Comparison of dose calculation algorithms for treatment planning in external photon beam therapy for clinical situations, *Physics in Medicine & Biology* 51 (22) (2006) 5785. doi:10.1088/0031-9155/51/22/005.
- [24] J. Huang, D. Followill, X. Wang, S. Kry, Accuracy and sources of error of out-of field dose calculations by a commercial treatment planning system for intensity-modulated radiation therapy treatments, *J Appl Clin Med Phys* 14 (2) (2013) 4139. doi:10.1120/jacmp.v14i2.4139.
- [25] D. W. O. Rogers, Fifty years of monte carlo simulations for medical physics, *Physics in Medicine & Biology* 51 (13) (2006) R287. doi:10.1088/0031-9155/51/13/R17.
- [26] L. Beaulieu, Å. Carlsson Tedgren, J.-F. Carrier, S. D. Davis, F. Mourtada, M. J. Rivard, R. M. Thomson, F. Verhaegen, T. A. Wareing, J. F. Williamson, Report of the Task Group 186 on model-based dose calculation methods in brachytherapy beyond the

- TG-43 formalism: Current status and recommendations for clinical implementation, *Medical Physics* 39 (10) (2012) 6208–6236. doi:10.1118/1.4747264.
- [27] S. L. Bowen, Y. Yang, Y. Wu, S. R. Cherry, J. M. Boone, W. W. Moses, R. D. Badawi, Monte Carlo Simulation Study of Several Camera Designs for the PET Component of a Dedicated Breast PET/CT Scanner, in: 2006 IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record, Vol. 6, 2006, pp. 3920–3924. doi:10.1109/NSSMIC.2006.353845.
- [28] H. Zhu, F. Gao, W. Wu, F. Liu, Dynamic bowtie filter design with Monte Carlo simulation for cone-beam CT, in: 2017 29th Chinese Control And Decision Conference (CCDC), 2017, pp. 3160–3165. doi:10.1109/CCDC.2017.7979051.
- [29] M. Bazalova, F. Verhaegen, Monte Carlo simulation of a computed tomography x-ray tube, *Physics in Medicine and Biology* 52 (19) (2007) 5945–5955. doi:10.1088/0031-9155/52/19/015.
- [30] D. Granero, J. Pérez-Calatayud, J. Gimeno, F. Ballester, E. Casal, V. Crispín, R. V. der Laarse, Design and evaluation of a HDR skin applicator with flattening filter, *Medical Physics* 35 (2) (2008) 495–503.
- [31] H.-H. Hsu, D. G. Vasilik, J. Chen, An optimal target-filter system for electron beam generated x-ray spectra, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 355 (2) (1995) 641–644.
- [32] R. C. McCall, R. D. McIntyre, W. G. Turnbull, Improvement of linear accelerator depth-dose curves, *Medical Physics* 5 (6) (1978) 518–524.
- [33] P. Andreo, Monte Carlo techniques in medical radiation physics, *Physics in Medicine and Biology* 36 (7) (1991) 861–920. doi:10.1088/0031-9155/36/7/001.
- [34] I. J. Chetty, B. Curran, J. E. Cygler, J. J. DeMarco, G. Ezzell, B. A. Faddegon, I. Kawrakow, P. J. Keall, H. Liu, C.-M. C. Ma, D. W. O. Rogers, J. Seuntjens, D. Sheikh-Bagheri, J. V. Siebers, Report of the AAPM Task Group No. 105: Issues associated with clinical implementation of Monte Carlo-based photon and electron external beam treatment planning, *Medical Physics* 34 (12) (2007) 4818–4853.
- [35] J. Fernández-Varea, P. Carrasco, V. Panettieri, L. Brualla, Monte Carlo based water/medium stopping-power ratios for various ICRP and ICRU tissues, *Phys Med Biol* 52 (2007) 6475–6483.
- [36] I. Kawrakow, M. Fippel, K. Friedrich, 3D electron dose calculation using a voxel based Monte Carlo algorithm (VMC), *Med Phys* 23 (4) (1996) 445–457. doi:10.1118/1.597673.
- [37] N. Reynaert, S. van der Marck, D. Schaart, W. Van der Zee, C. Van Vliet-Vroegindewij, M. Tomsej, J. Jansen, B. Heijmen, M. Coghe, C. De Wagter, Monte Carlo treatment planning for photon and electron beams, *Radiation Physics and Chemistry* 76 (4) (2007) 643–686. doi:https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2006.05.015.
- URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X06003288>

- [38] H. Neuenschwander, T. Mackie, P. Reckwerdt, Mmc: A high-performance monte carlo code for electron beam treatment planning, *Phys. Med. Biol.* 40 (1995) 543–574.
- [39] A. F. Bielajew, Monte carlo modelling in external electron-beam radiotherapy—why leave it to chance?, *Proc. of the 11th Conf. on the Use of Computers in Radiotherapy* (Madison, WI: Medical Physics Publishing) (1994) 2–5.
- [40] A. F. Bielajew, Monte carlo dose calculation: why gamble with anything else?, *Proc. of the First International Workshop on EGS4* (1997) 310–323.
- [41] R. Mohan, Why monte carlo?, *Proceedings of the 12th Conference on the Use of Computers in Radiotherapy*. (Madison, WI: Medical Physics Publishing) (1997) 16–18.
- [42] C. L. Hartmann-Siantar, P. M. Bergstrom, W. P. Chandler, Lawrence livermore national laboratory's peregrine project (1997) 19–22.
- [43] Monya Baker, Is there a reproducibility crisis? a nature survey lifts the lid on how researchers view the 'crisis' rocking science and what they think will help, *Nature* (2016).
- [44] B. Lindell, H. J. Dunster, J. Valentin, *International Commission on Radiological Protection: History, Policies, Procedures*, ICRP, 1998.
- [45] F. Attix, The partition of kerma to account for bremsstrahlung, *Health Physics*, 36(3), 347-354 (1979). doi:10.1097/00004032-197903000-00012.
- [46] E. B. Podgorsak", "Radiation Oncology Physics: A handbook for teachers and students", IAEA Library Cataloguing in Publication Data", "2005".
- [47] J. E. Turner, *Atoms, Radiation, and Radiation Protection*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007.
- [48] A. Pilar, M. Gupta, S. Laskar, Intraoperative radiotherapy: review of techniques and results, *Ecancermedicallscience* 11 (2017) 750.
- [49] A. Nevelsky, Z. Bernstein, R. Bar-Deroma, A. Kuten, I. Orion, Design and dosimetry characteristics of a commercial applicator system for intra-operative electron beam therapy utilizing elekta precise accelerator, *Journal of applied clinical medical physics / American College of Medical Physics* 11 (2010) 3244.
- [50] P. Björk, T. Knöös, P. Nilsson, K. Larsson, Design and dosimetry characteristics of a soft-docking system for intraoperative radiation therapy, *International Journal of Radiation Oncology Biology Physics* 47 (2000) 527–533.
- [51] S. Righi, E. Karaj, G. Felici, F. Di Martino, Dosimetric characteristics of electron beams produced by two mobile accelerators, novac7 and liac, for intraoperative radiation therapy through monte carlo simulation, *Journal of applied clinical medical physics / American College of Medical Physics* 14 (2013) 3678.
- [52] E. Lamanna, A. Gallo, F. Russo, R. Brancaccio, A. Soriani, L. Strigari, *Intra-Operative Radiotherapy with Electron Beam*, 2012.

- [53] A. S. Beddar, P. J. Biggs, S. Chang, G. A. Ezzell, B. A. Faddegon, F. W. Hensley, M. Mills, Intraoperative radiation therapy using mobile electron linear accelerators: report of aapm radiation therapy committee task group no. 72, *Medical Physics* 33 (2006) 1476–1489.
- [54] National Council on Radiation Protection and Measurements, *Structural Shielding Design and Evaluation for Megavoltage X- and Gamma-Ray Radiotherapy Facilities*, National Council on Radiation Protection and Measurements, 2005.
- [55] P. Björk, P. Nilsson, T. Knöös, Dosimetry characteristics of degraded electron beams investigated by monte carlo calculations in a setup for intraoperative radiation therapy, *Physics in Medicine and Biology* 47 (2002) 239–256.
- [56] AAPM Report No. 142, Task Group 142 report: Quality assurance of medical accelerators, American Association of Physicists in Medicine, 2009.
- [57] NCRP Report No. 69, *Dosimetry of X-Ray and Gamma-Ray Beams for Radiation Therapy in the Energy Range 10 keV to 50 MeV*, National Council on Radiation Protection and Measurements, 1981.
- [58] F. M. Khan, *Treatment Planning in Radiation Oncology*, 2nd Edition, Lippincott Williams & Wilkins, Philadelphia, 2007.
- [59] American Association of Physicists in Medicine Radiation Therapy Committee Task Group 53, *Quality assurance for clinical radiotherapy treatment planning*, Tech. Rep. Report No. 062, American Association of Physicists in Medicine (1998).
- [60] American Association of Physicists in Medicine Task Group 275, *Strategies for effective physics plan and chart review in radiation therapy: Report of aapm task group 275*, Tech. Rep. Report No. 275, American Association of Physicists in Medicine (2020).
- [61] International Atomic Energy Agency, *Aspectos físicos de la garantía de calidad en radioterapia: Protocolo de control de calidad*, Tech. Rep. IAEA-TECDOC-1151, International Atomic Energy Agency, Viena (2000).
- [62] A. Martignano, L. Menegotti, A. Valentini, Monte carlo investigation of breast intraoperative radiation therapy with metal attenuator plates, *Med Phys* 34 (12) (2007) 4578–4584. doi:10.1118/1.2805089.
- [63] A. Biete, G. Oses, Intraoperative radiation therapy in uterine cervical cancer: A review, *Rep Pract Oncol Radiother* 23 (6) (2018) 589–594. doi:10.1016/j.rpor.2018.07.005.
- [64] E. Sanchis, S. Casans, R. García-Gil, J. Martos, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, M. J. Pérez-Calatayud, J. Pérez-Calatayud, Improving bleeding detector features for electron intraoperative radiotherapy, *Physics in Medicine* 65 (2019) 150–156.
- [65] H. Alhamada, S. Simon, C. Philippon, C. Vandekerkhove, Y. Jourani, N. Pauly, D. Van Gestel, N. Reynaert, Monte carlo dose calculations of shielding disks with different material combinations in intraoperative electron radiation therapy (ioert), *Cancer Radiother* 24 (2020) 128–134.

- [66] T. Oshima, Y. Aoyama, T. Shimozato, M. Sawaki, T. Imai, Y. Ito, et al., An experimental attenuation plate to improve the dose distribution in intraoperative electron beam radiotherapy for breast cancer, *Phys Med Biol* 54 (2009) 3491.
- [67] G. Russo, C. Casarino, G. Arnetta, G. Candiano, A. Stefano, F. Alongi, G. Borasi, C. Messa, M. C. Gilardi, Dose distribution changes with shielding disc misalignments and wrong orientations in breast iort: a monte carlo - geant4 and experimental study, *Journal of applied clinical medical physics / American College of Medical Physics* 13 (2012) 3817.
- [68] M. Valdivieso-Casique, R. Rodríguez, S. Rodríguez-Bescós, D. Lardies, P. Guerra, M. Ledesma, A. Santos, P. Ibáñez, M. Vidal, J. Udías, et al., Radiance—a planning software for intra-operative radiation therapy, *Transl. Cancer Res.* 4 (2015) 196–209.
- [69] SIT Sordina, TPS IORT ECHO, <https://www.soiort.com/treatment-planning-system-tps/>, consultat en març del 2022.
- [70] L. Zheng-Ming, A. Brahme, An overview of the transport theory of charged particles, *Radiation Physics and Chemistry* 41 (4) (1993) 673 – 703. doi:10.1016/0969-806X(93)90318-0.
- [71] J. H. Halton, A retrospective and prospective survey of the monte carlo method, *SIAM Review* 12 (1) (1970) 1–63.
URL <http://www.jstor.org/stable/2029039>
- [72] M. Kalos, P. Whitlock, Monte Carlo Methods, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2008. doi:10.1002/9783527626212.
URL <http://dx.doi.org/10.1002/9783527626212>
- [73] F. James, Monte carlo theory and practice, *Reports on Progress in Physics* 43 (9) (1980) 1145–1189. doi:10.1088/0034-4885/43/9/002.
- [74] F. Salvat, Penelope 2018: A code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport.
- [75] L. Alamos National Laboratory, MCNP-A: General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport, version 4C (2000).
- [76] D. Lehmer, Mathematical methods in large-scale computing units, *Harvard University Computing Announcements* 26 (1951) 141.
- [77] P. P. Wilson, T. J. Tautges, J. A. Kraftcheck, B. M. Smith, D. L. Henderson, Acceleration techniques for the direct use of cad-based geometry in fusion neutronics analysis, *Fusion Engineering and Design* 85 (10) (2010) 1759–1765, proceedings of the Ninth International Symposium on Fusion Nuclear Technology. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.05.030>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920379610002425>
- [78] C.H. Kim, Y.S. Yeom, N. Petoussi-Henss, M. Zankl, W.E. Bolch, C. Lee, C. Choi, T.T. Nguyen, K. Eckerman, H.S. Kim, M.C. Han, R. Qiu, B.S. Chung, H. Han, B. Shin, Adult mesh-type reference computational phantoms. ICRP Publication 145. *Ann. ICRP, ICRP* 49 (3) (2020).

- [79] Dassault Systèmes Simulia, Inc., ABAQUS USER MANUALS, Version 6.9, Providence, RI (2009).
- [80] Iaea public database of clinical PHSP data, <https://www-nds.iaea.org/phsp/phsp.htmlx>, accessed: 2023-04-30.
- [81] M. Chabbi, S. Wen, X. Liu, Featherlight on-the-fly false-sharing detection, in: Proceedings of the 23rd ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming, PPOPP '18, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2018, p. 152–167. doi:10.1145/3178487.3178499.
- [82] C. DeLozier, A. Eizenberg, S. Hu, G. Pokam, J. Devietti, Tmi: Thread memory isolation for false sharing repair, in: Proceedings of the 50th Annual IEEE/ACM International Symposium on Microarchitecture, MICRO-50 '17, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2017, p. 639–650. doi:10.1145/3123939.3123947.
- [83] T. A. Khan, Y. Zhao, G. Pokam, B. Mozafari, B. Kasikci, Huron: Hybrid false sharing detection and repair, in: Proceedings of the 40th ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation, PLDI 2019, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2019, p. 453–468.
- [84] Y. Ma, J. Vijande, F. Ballester, Åsa Carlsson Tedgren, D. Granero, A. Haworth, F. Mourtada, G. P. Fonseca, K. Zourari, P. Papagiannis, M. J. Rivard, F.-A. Siebert, R. S. Sloboda, R. Smith, M. J. P. Chamberland, R. M. Thomson, F. Verhaegen, L. Beaulieu, A generic tg-186 shielded applicator for commissioning model-based dose calculation algorithms for high-dose-rate 192ir brachytherapy, *Physics in Medicine & Biology* (2021). doi:10.1088/1361-6560/abef53.
- [85] I. Kawrakow, D. W. O. Rogers, The EGSnrc code system: Monte Carlo simulation of electron and photon transport, Tech. Rep. PIRS-701, National Research Council of Canada, Ottawa (2001).
- [86] H. Hirayama, Y. Namito, A. F. Bielajew, S. J. Wilderman, W. R. Nelson, The EGS5 Code System, Tech. Rep. SLAC-R-730 (KEK 2005-8), Stanford Linear Accelerator Center, Menlo Park, California (2006).
- [87] A. Ferrari, P. R. Sala, A. Fassò, J. Ranft, FLUKA: A multi-particle transport code (program version 2005), CERN Yellow Reports: Monographs, CERN, Geneva, 2005.
- [88] J. Baró, J. Sempau, J. M. Fernández-Varea, F. Salvat, Penelope: An algorithm for monte carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter, *Nuclear Instruments and Methods B* 100 (1995) 31–46.
- [89] Los Alamos National Laboratory, MCNP – A general Monte Carlo N-particle transport code, Version 1, Tech. rep., Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM (1979).
- [90] S. Jan, G. Santin, D. S. et al., GATE: a simulation toolkit for PET and SPECT, *Phys. Med. Biol.* 49 (2004) 4543.
- [91] J. Sempau, A. Badal, L. Brualla, A penelope-based system for the automated monte carlo simulation of clinacs and voxelized geometries application to far-from-axis fields, *Med Phys* 38 (11) (2011) 5887–5895.

- [92] V. Giménez-Alventosa, V. Giménez Gómez, S. Oliver, Penred: An extensible and parallel monte-carlo framework for radiation transport based on penelope, *Computer Physics Communications* 267 (2021) 108065. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465521001776>
- [93] S. Oliver, V. Giménez-Alventosa, F. Berumen, V. Gimenez, L. Beaulieu, F. Ballester, J. Vijande, Benchmark of the penred monte carlo framework for hdr brachytherapy, *Zeitschrift für Medizinische Physik* 33 (4) (2023) 511–528. doi:<https://doi.org/10.1016/j.zemedi.2022.11.002>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0939388922001040>
- [94] C. J. Everett, E. D. Cashwell, Mcp code fluorescence routine discussion, Report LA-5240-MS, Los Alamos National Laboratory (1973).
- [95] E. Storm, H. I. Israel, Photon cross sections from 1 kev to 100 mev for elements z=1 to z=100, *Nuclear Data Tables A7* (1970) 565–681.
- [96] R. C. Little, New photon library from endf data, LANL internal memorandum to Buck Thompson, LA-UR-03-0164 (1982).
- [97] K. J. Adams, Electron upgrade for mcnp4b, Report LA-UR-00-3581, Los Alamos National Laboratory (2000).
- [98] D. B. Pelowitz, J. T. Goorley, M. R. James, T. E. Booth, F. B. Brown, J. S. Bull, L. J. Cox, J. Durkee, J. W., J. S. Elson, M. L. Fensin, R. A. Forster, III, J. S. Hendricks, H. G. Hughes, III, R. C. Johns, B. C. Kiedrowski, R. L. Martz, S. G. Mashnik, G. W. McKinney, R. E. Prael, J. E. Sweezy, L. S. Waters, T. A. Wilcox, A. J. Zukaitis, Mcnp6 user's manual, Technical Report LA-CP-13-00634, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, USA, this document is provided in the MCNP6 release package available from RSICC and is not accessible from the MCNP website. Code Version 6.1 (May 2013) (2013).
- [99] C. J. Werner, J. C. Armstrong, F. B. Brown, J. S. Bull, L. Casswell, L. J. Cox, D. A. Dixon, R. A. Forster, III, J. T. Goorley, H. G. Hughes, III, J. A. Favorite, R. L. Martz, S. G. Mashnik, M. E. Rising, C. J. Solomon, Jr., A. Sood, J. E. Sweezy, A. J. Zukaitis, C. A. Anderson, J. S. Elson, J. W. Durkee, Jr., R. C. Johns, G. W. McKinney, G. E. McMath, J. S. Hendricks, D. B. Pelowitz, R. E. Prael, T. E. Booth, M. R. James, M. L. Fensin, T. A. Wilcox, B. C. Kiedrowski, Mcnp user's manual code version 6.2, Technical Report LA-UR-17-29981, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, USA (October 2017).
URL <http://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-UR-17-29981>
- [100] S. M. Seltzer, M. J. Berger, 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 (1985) 95–134.

- [101] S. M. Seltzer, M. J. Berger, Bremsstrahlung energy spectra from electron with kinetic energy 1 keV-10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with $Z=1-100$, *At. Data Nucl. Data Tables* 35 (1986) 345–418.
- [102] D. T. Cromer, D. Liberman, Relativistic Calculation of Anomalous Scattering Factors for X Rays, *The Journal of Chemical Physics* 53 (1970) 1891–1898.
- [103] D. Brusa, G. Stutz, J. A. Riveros, J. M. Fernández-Varea, and F. Salvat, Fast sampling algorithm for the simulation of photon Compton scattering, *Nucl. Instrum. Meth. A* 379 (1996) 167–175.
- [104] L. Sabbatucci and F. Salvat, Theory and calculation of the atomic photoeffect, *Rad. Phys. Chem.* 121 (2016) 122–140.
- [105] R. H. Pratt, H. K. Tseng, Behavior of electron wave functions near the atomic nucleus and normalization screening theory in the atomic photoeffect, *Physical Rev. A* 5 (1972) 1063–1072.
- [106] S. Perkins, D. Cullen, M. Chen, J. Rathkopf, J. Scofield, J. Hubbell, Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), $Z = 1-100$, Vol. UCRL-50400 vol.30, US Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information, United States, 1991.
- [107] R. D. Deslattes, E. G. Kessler, P. Indelicato, L. de Billy, E. Lindroth, J. Anton, X-ray transition energies: new approach to a comprehensive evaluation, *Rev. Mod. Phys.* 75 (2003) 35–99. doi:10.1103/RevModPhys.75.35.
- [108] J. A. Bearden, X-ray wavelengths, *Rev. Mod. Phys.* 39 (1967) 78–124. doi:10.1103/RevModPhys.39.78.
- [109] E. García-Toraño, V. Peyres, M.-M. Bé, C. Dulieu, M.-C. Lépy, F. Salvat, Simulation of decay processes and radiation transport times in radioactivity measurements, *Nucl. Inst. Meth. B* 396 (2017) 43–49.
- [110] E. García-Toraño, V. Peyres, F. Salvat, Pennuc: Monte Carlo simulation of the decay of radionuclides, *Computer Physics Communications* (2019).
- [111] DcmTk, <https://github.com/DCMTK/dcmTk>, accessed: 2019-09-28.
- [112] International Commission on Radiation Units and Measurements, Key Data for Ionizing Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications (ICRU Report Vol 90), International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 2016.
- [113] ICRP, Adult reference computational phantoms, ICRP Publication 110 (2009) *Ann. ICRP* 39 (2).
- [114] S. J. Verhaegen F, Monte Carlo modelling of external radio-therapy photon beams, *Physics in Medicine & Biology* 48 (21) (2003) R107–R164.
- [115] H. K. R. Bieda M. R., Antolak J. A., The effect of scattering foil parameters on electron-beam Monte Carlo calculations, *Med. Phys.* 28 (2001) 2527–2534.

- [116] S.-B. D. y Rogers D. W. O., Monte carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the beam code., *Med. Phys.* 29 (2002) 391–402.
- [117] O. Chibani, B. Moftah, C.-.-M. Ma, On monte carlo modeling of megavoltage photon beams: A revisited study on the sensitivity of beam parameters, *Med. Phys.* 38 (2011) 188–201. doi:10.1118/1.3527973.
URL <https://doi.org/10.1118/1.3527973>
- [118] M. Bencheikh, A. Maghnouj, J. Tajmouati, et al., Validation of monte carlo simulation of 6 mv photon beam produced by varian clinac 2100 linear accelerator using beamnrc code and dosxyznrc code, *Phys. Part. Nuclei Lett.* 14 (2017) 780–787. doi:10.1134/S1547477117060138.
URL <https://doi.org/10.1134/S1547477117060138>
- [119] S. A. Pawiro, A. Azzi, D. S. Soejoko, A monte carlo study of photon beam characteristics on various linear accelerator filters, *J Biomed Phys Eng* 10 (5) (2020) 613–622. doi:10.31661/jbpe.v0i0.1192.
URL <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC7557471/>
- [120] M. Fiak, A. Fathi, J. Inchaouh, et al., Monte carlo simulation of a 18 mv medical linac photon beam using gate/geant4, *Moscow Univ. Phys.* 76 (2021) 15–21. doi:10.3103/S0027134921010024.
URL <https://doi.org/10.3103/S0027134921010024>
- [121] S. Francis, et al., Monte carlo simulation of linear accelerator for dosimetry analysis, in: 2021 6th International Conference for Convergence in Technology (I2CT), IEEE, Maharashtra, India, 2021, pp. 1–7. doi:10.1109/I2CT51789.2021.9458176.
URL <https://ieeexplore.ieee.org/document/9458176>
- [122] I. N. D. Section, Phase-space database for external beam radiotherapy (2006).
- [123] I. Kawrakow, E. Mainegra-Hing, D. W. O. Rogers, F. Tessier, The egsnrc code system: Monte carlo simulation of electron and photon transport, Technical Report PIRS-701, National Research Council, Canada (2017).
- [124] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee, G. Barrand, F. Behner, L. Bellagamba, J. Boudreau, L. Broglia, A. Brunengo, H. Burkhardt, S. Chauvie, J. Chuma, R. Chytracsek, G. Cooperman, G. Cosmo, P. Degtyarenko, A. Dell’Acqua, G. Depaola, D. Dietrich, R. Enami, A. Feliciello, C. Ferguson, H. Fesefeldt, G. Folger, F. Foppiano, A. Forti, S. Garelli, S. Giani, R. Giannitrapani, D. Gibin, J. Gómez Cadenas, I. González, G. Gracia Abril, G. Greeniaus, W. Greiner, V. Grichine, A. Grossheim, S. Guatelli, P. Gumplinger, R. Hamatsu, K. Hashimoto, H. Hasui, A. Heikkinen, A. Howard, V. Ivanchenko, A. Johnson, F. Jones, J. Kallenbach, N. Kanaya, M. Kawabata, Y. Kawabata, M. Kawaguti, S. Kelner, P. Kent, A. Kimura, T. Kodama, R. Kokoulin, M. Kossov, H. Kurashige, E. Lamanna, T. Lampén, V. Lara, V. Lefebure, F. Lei, M. Liendl, W. Lockman, F. Longo, S. Magni, M. Maire, E. Medernach, K. Minamimoto, P. Mora de Freitas, Y. Morita, K. Murakami, M. Nagamatu, R. Nartallo, P. Nieminen, T. Nishimura, K. Ohtsubo, M. Okamura, S. O’Neale, Y. Oohata, K. Paech, J. Perl, A. Pfeiffer, M. Pia, F. Ranjard, A. Rybin, S. Sadilov, E. Di Salvo, G. Santin, T. Sasaki, N. Savvas, Y. Sawada, S. Scherer, S. Sei, V. Sirotenko, D. Smith,

- N. Starkov, H. Stoecker, J. Sulkimo, M. Takahata, S. Tanaka, E. Tcherniaev, E. Safai Tehrani, M. Tropeano, P. Truscott, H. Uno, L. Urban, P. Urban, M. Verderi, A. Walkden, W. Wander, H. Weber, J. Wellisch, T. Wenaus, D. Williams, D. Wright, T. Yamada, H. Yoshida, D. Zschiesche, Geant4—a simulation toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 506 (3) (2003) 250–303. doi:[https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8).
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>
- [125] E. Commission, D.-G. for Research, Innovation, Open innovation, open science, open to the world : a vision for Europe, Publications Office, 2016. doi:[doi/10.2777/061652](https://doi.org/10.2777/061652).
- [126] European Commission, Goals of research and innovation policy (2022).
URL <https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/strategy/goals-research-and-innovation-policy>
- [127] IAEA, Implementation of the International Code of Practice on Dosimetry in Radiotherapy (TRS 398), International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria, 2005.
- [128] V. Giménez-Alventosa, V. Giménez, F. Ballester, J. Vijande, P. Andreo, Monte carlo calculation of beam quality correction factors for ptw cylindrical ionization chambers in photon beams, *Phys Med Biol* 65 (20) (2020) 205005.
- [129] L. Brualla, F. Salvat, R. Palanco-Zamora, Efficient monte carlo simulation of multileaf collimators using geometry-related variance reduction techniques, *Physics in Medicine and Biology* 54 (13) (2009) 4131–4149. doi:[10.1088/0031-9155/54/13/013](https://doi.org/10.1088/0031-9155/54/13/013).
- [130] IAEA Vienna, IAEA report. 2020. VarianClinac600C6MV.pdf, Tech. rep. (2020).
URL <http://www-nds.iaea.org/phsp/>
- [131] S. Morató, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, Varian clinac 6 mev photon spectra unfolding using a monte carlo meshed model, *EPJ Web of Conferences* 153 (2017) 04012, iCRS-13 & RPSD-2016.
- [132] I. Martínez Rovira, A. M., J. Fernández Varea, J. Sempau, Adaptación de peneasy/-penelope para el uso de la base de datos del oiea sobre espacios de fase de aceleradores lineales y unidades de cobaltoterapia 9 (3) (2008) 133–136.
- [133] L. Brualla, R. Palanco-Zamora, M. A. Duch, J. Sempau, Phase-space files documentation for:varian clinac 600 c photon beams varian clinac 2100 c/d electron beams, IAEA report (2010).
- [134] A. Badal, J. Sempau, A package of linux scripts for the parallelization of monte carlo simulations, *Comput. Phys. Commun.* 175 (2006) 440–450.
- [135] D. A. Low, W. B. Harms, S. Mutic, J. A. Purdy, A technique for the quantitative evaluation of dose distributions, *Medical Physics* 25 (5) (1998) 656–661.
- [136] P. Winkler, S. Odreitz-Stark, E. Haas, M. Thalhammer, R. Partl, Commissioning, dosimetric characterization and machine performance assessment of the liac hwl mobile accelerator for intraoperative radiotherapy, *Zeitschrift für Medizinische Physik*

- 30 (4) (2020) 279–288. doi:<https://doi.org/10.1016/j.zemedi.2020.06.004>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0939388920300635>
- [137] E. Mastella, K. E. Szilagyi, E. De Guglielmo, S. Fabbri, F. Calderoni, A. Stefanelli, G. Di Domenico, A. Turra, Dosimetric characterization of a mobile accelerator dedicated for intraoperative radiation therapy: Monte carlo simulations and experimental validation, *Physica Medica* 104 (2022) 167–173. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2022.11.006>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S112017972202097X>
- [138] E. Spezi, D. G. Lewis, C. W. Smith, Monte carlo simulation and dosimetric verification of radiotherapy beam modifiers, *Physics in Medicine and Biology* 46 (11) (2001) 3007–3029.
- [139] H.-H. Hsu, D. G. Vasilik, J. Chen, An optimal target-filter system for electron beam generated x-ray spectra, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 355 (2) (1995) 641–644.
- [140] S. Oliver, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, Toolkit implementation to exchange phase-space files between iaea and mcnp6 monte carlo code format, *Int J Radiat Biol* 99 (3) (2023) 373–383, epub 2023 Jan 17. doi:10.1080/09553002.2022.2110296.
- [141] G. Iaccarino, L. Strigari, M. D’Andrea, L. Bellesi, G. Felici, A. Ciccotelli, M. Benassi, A. Soriani, Monte carlo simulation of electron beams generated by a 12 mev dedicated mobile iort accelerator, *Physics in Medicine and Biology* 56 (14) (2011) 4579. doi:10.1088/0031-9155/56/14/022.
URL <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/56/14/022>
- [142] J. Sempau, A. Sánchez-Reyes, F. Salvat, H. O. ben Tahar, S. B. Jiang, J. M. Fernández-Varea, Monte carlo simulation of electron beams from an accelerator head using penelope, *Physics in Medicine and Biology* 46 (4) (2001) 1163–1186. doi:10.1088/0031-9155/46/4/318.
- [143] I. Méndez, A. Polšak, R. Hudej, B. Casar, The multigaussian method: a new approach to mitigating spatial heterogeneities with multichannel radiochromic film dosimetry, *Physics in Medicine & Biology* 63 (17) (2018) 175013.
- [144] R. Garcia-Gil, S. Casans, A. Edith Navarro, A.-J. García-Sánchez, J. J. Rovira-Escutia, D. Garcia-Costa, E. Sanchis-Sánchez, I. Pérez-Calatayud, J. Pérez-Calatayud, E. Sanchis, Embedded bleeding detector into a pmma applicator for electron intraoperative radiotherapy, *Physica Medica* 94 (2022) 35–42. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2021.12.018>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1120179721003720>
- [145] J. Seco, F. Verhaegen, *Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy*, CRC Press - Taylor & Francis Group, 2013.

- [146] A. L. Boyer, C. X. Yu, Intensity-modulated radiation therapy with dynamic multileaf collimators, *Seminars in Radiation Oncology* 9 (1999) 48–59.
- [147] M. G. Delichas, P. Mavroidis, B. C. Ferreira, C. Shi, A. Gutierrez, B. K. Lind, N. Papanikolaou, C. Ha, Comparison of 3d-crt, mlc-based imrt and helical tomotherapy for lung cancer radiotherapy, *International Journal of Radiation Oncology Biology Physics* 72 (1) (2008) S634.
- [148] M. Y. Herrassi, F. Bentayeb, M. R. Malisan, Comparative study of four advanced 3d-conformal radiation therapy treatment planning techniques for head and neck cancer, *Journal of Medical Physics* 38 (2) (2013) 98–105.
- [149] D. Sheikh-Bagheri, D. W. Rogers, Monte carlo calculation of nine mega-voltage photon beam spectra using the beam code, *Med. Phys.* 29 (3) (2002) 391–402.
- [150] I. A. E. Agency, Commissioning of radiotherapy treatment planning systems: Testing for typical external beam treatment techniques, *Tech. rep.* (2008).
- [151] T. Gray, N. Bassiri, N. Kirby, S. Stathakis, K. M. Mayer, Implementation of a simple clinical linear accelerator beam model in mcnp6 and comparison with measured beam characteristics, *Applied Radiation and Isotopes* 155 (2020) 108925. doi:<https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.108925>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969804318308868>
- [152] G4Tet.hh., [Online; accessed 28-July-2023].
URL <https://gitlab.cern.ch/geant4/geant4/-/blob/master/source/geometry/solids/specific/include/G4Tet.hh>.
- [153] M. C. Han, C. H. Kim, J. H. Jeong, Y. S. Yeom, S. Kim, P. P. H. Wilson, J. Apostolakis, Dagsolid: a new geant4 solid class for fast simulation in polygon-mesh geometry, *Physics in Medicine & Biology* 58 (13) (2013) 4595. doi:10.1088/0031-9155/58/13/4595. URL <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/58/13/4595>
- [154] P. P. Wilson, T. J. Tautges, J. A. Kraftcheck, B. M. Smith, D. L. Henderson, Acceleration techniques for the direct use of cad-based geometry in fusion neutronics analysis, *Fusion Engineering and Design* 85 (10) (2010) 1759–1765, proceedings of the Ninth International Symposium on Fusion Nuclear Technology. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.05.030>.
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920379610002425>
- [155] F. B. Brown, R. Barrett, T. Booth, J. Bull, L. Cox, R. Forster, T. Goorley, R. Mosteller, S. Post, R. Prael, et al., Mcnp version 5, *Trans. Am. Nucl. Soc* 87 (273) (2002) 02–3935.
- [156] R. L. Martz, Mcnp6 unstructured mesh initial validation and performance results, *Nuclear Technology* 180 (3) (2012) 316–335. arXiv:<https://doi.org/10.13182/NT12-A15347>, doi:10.13182/NT12-A15347.
URL <https://doi.org/10.13182/NT12-A15347>

- [157] A. Badal, I. Kyprianou, D. P. Banh, A. Badano, J. Sempau, penmesh—monte carlo radiation transport simulation in a triangle mesh geometry, *IEEE Transactions on Medical Imaging* 28 (12) (2009) 1894–1901. doi:10.1109/TMI.2009.2021615.
- [158] T. Möller, B. Trumbore, Fast, minimum storage ray/triangle intersection, in: *ACM SIGGRAPH 2005 Courses, SIGGRAPH '05*, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2005, p. 7–es. doi:10.1145/1198555.1198746.
URL <https://doi.org/10.1145/1198555.1198746>
- [159] J. Havel, A. Herout, Yet faster ray-triangle intersection (using sse4), *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 16 (3) (2010) 434–438. doi:10.1109/TVCG.2009.73.
- [160] A. Kensler, P. Shirley, Optimizing ray-triangle intersection via automated search, in: *2006 IEEE Symposium on Interactive Ray Tracing*, 2006, pp. 33–38. doi:10.1109/RT.2006.280212.