



VNIVERSITAT
DE VALÈNCIA

Mètodes de Monte Carlo avançats en dosimetria

Tesi Doctoral

Vicent Giménez Alventosa

Departament de Física Atòmica, Molecular i Nuclear
Programa de Doctorat en Física
Universitat de València

Dirigida per,

Javier Vijande Asenjo
Facundo Ballester Pallarès

Burjassot, 2021

Índex

Abreviatures	3
Llistat d'articles	5
Resum de la tesi	6
I Introducció	8
1 Contextualització	8
1.1 Dosimetria en braquiteràpia	12
1.2 Dosimetria en radioteràpia de feixos externs	13
1.3 Limitacions del Monte Carlo	14
1.4 Objectius	15
2 Protocols	16
2.1 Formalisme del TG-43	16
2.2 Limitacions del TG 43	20
2.3 MBDCA	21
2.4 Correccions sobre mesures en cambres d'ionització	22
3 Simulacions de Monte Carlo	27
3.1 PENELOPE	28
3.2 Classe II i paràmetres de simulació	33
3.3 Incerteses en simulacions Monte Carlo	40
3.4 Reducció de variància	42
3.5 PenEasy	46
4 Optimització	47
4.1 Memòria cau	47
4.2 Paral·lelisme	50
4.3 Polimorfisme en llenguatges orientats a objectes	60
II Recerca científica	67
1 Collision-kerma conversion between dose-to-tissue and dose-to-water by photon energy-fluence corrections in low-energy brachytherapy	67
1.1 Introducció i motivació	67
1.2 Objectius de l'estudi	68

1.3	Materials i mètodes	68
1.4	Resultats	71
1.5	Article	72
2	Correction factors for ionization chamber measurements with the “Valencia” and “large field Valencia” brachytherapy ap- plicators	92
2.1	Introducció i motivació	92
2.2	Objectius	93
2.3	Materials i mètodes	93
2.4	Resultats	95
2.5	Article	97
3	Monte Carlo calculation of beam quality correction factors for PTW cylindrical ionization chambers in photon beams .	108
3.1	Introducció i motivació	108
3.2	Objectius	108
3.3	Materials i mètodes	108
3.4	Resultats	111
3.5	Article	112
4	PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE	124
4.1	Introducció i motivació	124
4.2	Objectius	125
4.3	Materials i mètodes	125
4.4	Resultats	127
4.5	Article	127
5	Conclusions	140
	Agraïments	143
	A Codis	144

Abreviatures

- AAPM** *American Association of Physicists in Medicine.* 10, 16
- ABG** *Australasian Brachytherapy Group.* 13
- DWBA** *Distorted-Wave Born Approximation.* 30
- ELTB** *Equació Lineal de Transport de Boltzmann.* 22
- EPC** *Equilibri de Partícules Carregades.* 11, 20, 94
- ESTRO** *European Society for Therapeutic Radiology and Oncology.* 10, 13
- GOS** *Sternheimer–Liljequist generalized oscillator strength.* 30
- IAEA** *International Atomic Energy Agency.* 10, 13, 27, 108
- IF** *Interacció Forçada.* 43, 44
- LIFO** *Last In First Out.* 29
- MBDCA** *Model-Based Dose Calculation Algorithms.* 13, 21
- NNDC** *USA National Nuclear Data Center.* 68
- OO** *Orientats a Objectes.* 60, 125
- PAHO** *Pan-American Health Organization.* 10, 13, 108
- SCD** *Source to Chamber Distance.* 26, 110, 111
- SED** *Secció Eficax Diferencial.* 29, 36–38
- SPT** *Sistemes de Planificació de Tractament.* 13, 21, 22, 71, 140
- TC** *Tomografia Computeritzada.* 21

TPR *Tissue Phantom Ratio.* 26

TRS *Technical Report Series.* 23

TVF *Taules Virtuals de Funcions.* 62

WHO *World Health Organization.* 10, 13, 108

Llistat d'articles

La tesi presentada es basa en els següents treballs,

1. Giménez-Alventosa V, Antunes PC, Vijande J, Ballester F, Pérez-Calatayud J, Andreo P. Collision-kerma conversion between dose-to-tissue and dose-to-water by photon energy-fluence corrections in low-energy brachytherapy. *Phys Med Biol.* 2017 Jan 7;62(1):146-164. doi: 10.1088/1361-6560/aa4f6a. Epub 2016 Dec 17. PMID: 27991455.
2. Giménez-Alventosa V, Giménez V, Ballester F, Vijande J, Andreo P. Correction factors for ionization chamber measurements with the “Valencia” and “large field Valencia” brachytherapy applicators. *Phys Med Biol.* 2018 Jun 8;63(12):125004. doi: 10.1088/1361-6560/aac27a. PMID: 29726409.
3. Giménez-Alventosa V, Giménez V, Ballester F, Vijande J, Andreo P. Monte Carlo calculation of beam quality correction factors for PTW cylindrical ionization chambers in photon beams. *Phys Med Biol.* 2020 Oct 7;65(20):205005. doi: 10.1088/1361-6560/ab9501. PMID: 32434170
4. 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*, Volume 267, 2021, ISSN 0010-4655, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108065>.

Resum de la tesi

La tesi presentada a aquest document s'emmarca dins de l'àmbit de la física mèdica. Dins d'aquesta branca de la física, s'estudien, entre altres, millores per al diagnòstic i tractaments oncològics que involucren radiació ionitzat. Dues de les tècniques més emprades hui dia per al tractament de lesions tumorals, són la braquiteràpia i la radioteràpia. Els tractaments de braquiteràpia consisteixen en introduir material radioactiu a l'interior del pacient, en forma de llavors. Pel contrari, la radioteràpia, consisteix en la irradiació externa del pacient amb feixos produïts per acceleradors mèdics. Tot i que les tècniques són molt diferents, ambdues necessiten una planificació prèvia del tractament. En esta, es calculen els factors dosimètrics d'interès, com dosi total absorbida a la regió tumoral o a la resta de teixits de risc propers a la zona objectiu del tractament. Dites planificacions requereixen un càlcul previ que es pot efectuar mitjançant diferents tècniques. Entre totes elles, la considerada com la més precisa són les simulacions de Monte Carlo. Aquestes simulacions, permeten la construcció detallada de les geometries del sistema, format per accelerador, pacient, etc, així com descriure minuciosament les fonts de radiació. D'aquesta manera s'obtenen resultats molt precisos del transport de la radiació a través de la matèria.

Dels treballs publicats que componen aquesta tesi, els tres primers tenen una contribució directa en els càlculs dosimètrics explicats.

El primer d'ells discuteix la necessitat de millorar les correccions emprades típicament, en el moment de la publicació, per transformar la dosi absorbida en aigua en dosi en teixit. Aquest càlcul s'aplica a tractaments de braquiteràpia on els mapes de dosi en aigua per a diferents llavors radioactives estan tabulats seguint el formalisme descrit al TG-43. Per a suplir aquesta necessitat, es proporciona una metodologia clara, i fàcilment aplicable als planificadors de tractament, per calcular els factors correctors adients basats en les variacions de fluència energètica. A més, es calculen els factors corresponents per a tres llavors emprades en clínica (^{103}Pd , ^{125}I i ^{131}Cs).

Al segon treball, s'estudien els factors correctors necessaris per a realitzar mesures amb cambres d'ionització de la dosi depositada per dos aplicadors, el "Valencia" i el "large field Valencia". El primer d'ells ja s'emprava clínicament en el moment de publicació del treball, mentre que l'estudi del

segon aplicador va contribuir a la seua caracterització. En aquest, s'estudien i es comparen tres mètodes per a obtenir els factors correctors, amb i sense desplaçament del punt efectiu de mesura de la cambra d'ionització. Les diferències entre els factors calculats amb ambdós aplicadors, emprant la mateixa cambra d'ionització, fan palès de la influència de l'aplicador en el càlcul d'aquests factors i, per tant, la necessitat de realitzar un estudi individualitzat per a cada parell aplicador-cambra. El treball proporciona una metodologia clara per a realitzar aquest tipus de càlculs i estendre els resultats a altres parells d'aplicadors i cambres.

El tercer treball estudia els factors correctors de qualitat del feix per a feixos de fotons d'energies de l'ordre del MV amb huit cambres d'ionització diferents. L'objectiu d'aquest estudi, junt als resultats d'altres grups independents, és actualitzar les dades proporcionades al TRS 398, les quals s'empren a tractaments clínics arreu del món. Els resultats obtinguts estan en concordança amb els de la resta de grups independents i satisfan les exigències d'incertesa estadística, per baix del 0.1%.

Arrel dels treballs anteriors i de l'alt cost computacional requerit per a dur a terme les simulacions amb incerteses tan baixes, el quart treball presentat es centra en el desenvolupament d'eines per a simular aquest tipus de càlculs. Més específicament, el treball presenta un codi de simulació Monte Carlo anomenat PenRed. Aquest, incorpora tota la funcionalitat de PENELOPE, però s'ha reestructurat, optimitzat i paral·lelitzat per fer-lo més eficient i fàcilment extensible. Amb aquest treball s'ha aconseguit millorar els temps de còmput de les simulacions, així com proporcionar una estructura modular orientada a objectes que permet a l'usuari adaptar el codi a les seues necessitats de manera senzilla.

Capítol I

Introducció

A aquest capítol, es presenta una contextualització de la tesi i s'introdueix el fonament teòric dels treballs presentats. Així doncs, en primer lloc es descriurà el context en el que s'emmarca el present document, en específic la importància i inclusió de les tècniques de Monte Carlo a la dosimetria en braquiteràpia i en tractaments de radiació externa. Tot seguit es descriuen els detalls necessaris per a simular aquest tipus de tècniques, així com el codi emprat, els paràmetres corresponents i altres aspectes clau. Finalment, es motivarà la necessitat d'accelerar les simulacions Monte Carlo i es discutiran diferents tècniques per a aconseguir-ho.

1 Contextualització

Els treballs desenvolupats al present document, es centren en dos tipus de tractaments oncològics basats en radiació, braquiteràpia i radioteràpia externa. En primer lloc, els tractaments de braquiteràpia [1] empren fonts radioactives encapsulades, o llavors, que es situen a l'interior del pacient en posicions pròximes a la lesió a tractar. Aquestes llavors radioactives emetran radiació que es concentrarà a la zona afectada mantenint una baixa deposició de dosi als teixits circumdants. En conseqüència, la braquiteràpia s'empra sobre tot en tumors menuts i ben localitzats. Cal remarcar que, per tal d'aconseguir una distribució de dosi pertinent, és necessari efectuar una planificació prèvia, per determinar el nombre de llavors i les posicions on es col·locaran. A més, la planificació es veurà influenciada per les característiques de les llavors, com el seu encapsulat, activitat, radioisòtop i altres factors que afecten a la distribució de dosi al seu voltant.



Figura I.1: Exemple de llavors radioactives de Eckert & Ziegler BEBIG. Imatge obtinguda de la seua pàgina web².

D'altra banda, la radioteràpia externa [2] involucra feixos de radiació generats a l'exterior del pacient. Els feixos, incidiran sobre el pacient des de diferents angles per tal de concentrar la dosi en la zona de la lesió i minimitzar la dosi depositada a la resta de teixits. En aquest cas, per tal d'aconseguir la distribució pertinent, caldrà igualment efectuar una planificació prèvia del tractament, la qual dependrà de les característiques del feix, com energia, tipus de radiació, dimensió del camp, a més del tipus de lesió.

Com hem vist, independentment del tractament emprat, calen mètodes o formalismes per tal de realitzar els càlculs dosimètrics necessaris per a la planificació. Al llarg dels anys s'han desenvolupat de forma independent diferents protocols i formalismes per a dosimetria de tot tipus. Com a conseqüència es produïren diferents formes, nomenclatures i magnituds per a estandarditzar els càlculs de dosi i les cal·libracions dels aparells involucrats. Per exemple, a l'hora de caracteritzar fonts de radiació de braquiteràpia o cambres d'ionització i feixos externs de partícules. Aquesta diversitat de treballs va provocar una situació de confusió entre els físics a l'hora d'eleger quin protocol seguir, el que al seu torn suposava un impediment per a comparar resultats entre institucions, tant nacionals com internacionals, ja que no es disposava d'un protocol unificat.

²<https://www.bebig.com/home/>

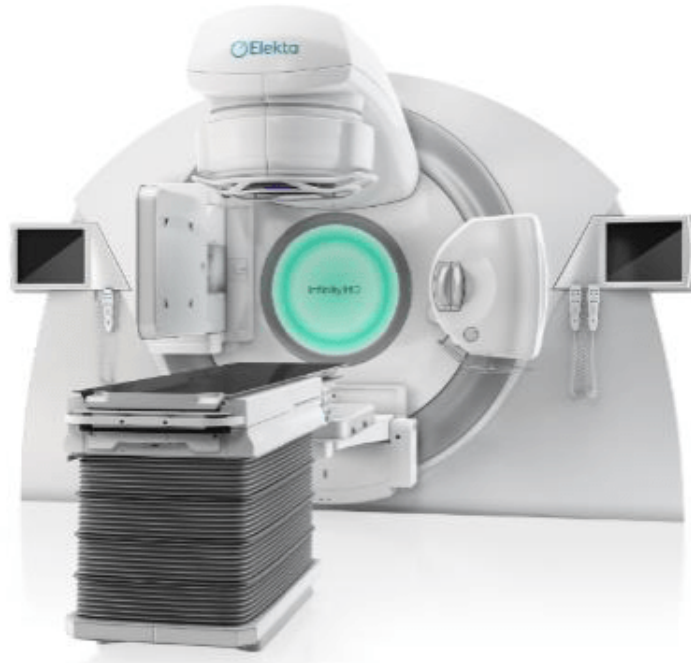


Figura I.2: Exemple d'accelerador lineal d'Elekta. Imatge obtinguda de la seua pàgina web⁴.

Per aquest motiu, diferents organitzacions decidiren crear grups de treball amb l'objectiu de revisar la bibliografia disponible i proposar protocols unificats per a determinats propòsits. Un exemple és el TG-43 [3], desenvolupat per la *American Association of Physicists in Medicine* (AAPM), que, com veurem, proposa un formalisme per estandarditzar la dosimetria en braquiteràpia. D'altra banda, la IAEA (*International Atomic Energy Agency*), en col·laboració amb la ESTRO (*European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*), la WHO (*World Health Organization*) i la PAHO (*Pan-American Health Organization*) desenvoluparen una guia per a la calibració de cambres d'ionització en termes de dosi absorbida en aigua. A més, establiren pautes per a l'ús d'aquests detectors en la determinació de la dosi absorbida en aigua quan s'empren feixos de radiació en tractaments de radioteràpia. Aquesta guia es troba recollida al TRS-398 [4].

L'ús d'aquests protocols unificats s'ha estès arreu del món, facilitant, entre altres, la tasca dels radiofísics en planificació de tractaments oncològics. Malauradament, tot i que aquests protocols es revisen i actualitzen, alguns dels emprats actualment a l'àmbit clínic es basen en càlculs dosimètrics en aigua. Posteriorment, per tal d'obtenir les diposicions de dosi als diferents teixits humans, s'empren aproximacions, les quals produeixen incerteses no menyspreables a aquest tipus de càlculs. Un recurs molt em-

⁴<https://www.elekta.com/radiotherapy>

prat a l'hora de transformar la dosi absorbida en aigua a un altre teixit, o per poder relacionar la dosi mesurada a un dosímetre en dosi absorbida pel medi, és la teoria de la cavitat [5]. Aquesta, ens permet relacionar la dosi depositada a un material dins d'un medi extern amb la que s'hauria depositat a dit medi en absència del material intern, o viceversa. No obstant, per a que siga aplicable cal que s'acomplisquen una sèrie de condicions.

Al cas de partícules carregades, hem d'assegurar que el material intern, el dosímetre a l'exemple anterior, és suficientment prim com per a que el poder de frenat de col·lisió es mantinga pràcticament constant al travessar-lo i que les partícules travessen el material. És a dir, que la dispersió siga negligible. A més, s'assumeix que l'energia cinètica transferida al material per raigs δ^5 és negligible, ja siga perquè el material és prim en comparació a l'abast dels raigs δ o perquè aquest es troba en Equilibri de Partícules Carregades (EPC). En aquestes condicions, l'energia perduda per interaccions de col·lisió per un feix amb fluència Φ d'energia T_0 incidint perpendicularment a un material amb densitat per unitat d'àrea ρt (g/cm^2) és,

$$E = \Phi \left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_c \rho t \left(\frac{\text{MeV}}{\text{cm}^2} \right) \quad (\text{I.1})$$

on $(dT/\rho dx)_c$ és el poder de frenat màssic de col·lisió per a una energia T_0 . Dividint per la densitat de massa per unitat d'àrea obtenim la dosi,

$$D = \Phi \left(\frac{dT}{\rho dx} \right)_c (\text{MeV}/\text{g}) \quad (\text{I.2})$$

Finalment, si suposem que per a un mateix feix la fluència de partícules no es veu afectada pel canvi de material, podem relacionar les dosis absorbides al mateix volum per a un material g i un w com,

$$\frac{D_w}{D_g} = \frac{(dT/\rho dx)_{c,w}}{(dT/\rho dx)_{c,g}} \quad (\text{I.3})$$

Si pel contrari considerem un feix de fotons, s'empra l'anomenada teoria de cavitats grans per relacionar la dosi entre dos medis [6]. La cavitat en qüestió, ha d'acomplir la següent condició. La contribució a la dosi originada pels electrons fora de la cavitat és compensada amb la contribució dels electrons creats per interaccions de fotons a l'interior de la cavitat. Aquesta propietat s'aconsegueix si la cavitat presenta condicions d'EPC i l'abast dels electrons secundaris és menor que la mida de la cavitat. En aquest cas, la dosi dels dos medis es calcula a partir de la relació amb el kerma de col·lisió (K_c),

⁵Es considera raig delta als electrons secundaris que adquireixen suficient energia cinètica com per allunyar-se significativament del feix principal i ionitzar el medi.

$$\frac{D_w}{D_g} = \frac{(K_c)_w}{(K_c)_g} = \frac{\Psi_w \overline{(\mu_{en}/\rho)_w}}{\Psi_g \overline{(\mu_{en}/\rho)_g}} \quad (\text{I.4})$$

on (μ_{en}/ρ) és el coeficient d'absorció màssic, i Ψ la fluència energètica. A més, si la cavitat no modifica la fluència de fotons, l'expressió dependrà únicament del quocient dels coeficients d'absorció màssics,

$$\frac{D_w}{D_g} = \frac{\overline{(\mu_{en}/\rho)_w}}{\overline{(\mu_{en}/\rho)_g}} \quad (\text{I.5})$$

El problema d'aquests tipus de transformacions, és que, en general, no s'acompleixen les condicions que s'assumeixen i s'han d'aplicar correccions per a aconseguir resultats acceptables, com veurem.

Afortunadament, l'avanç de la computació ens ha proporcionat màquines més potents que han permès el desenvolupament de tècniques més precises, com el Monte Carlo, per a modelitzar i simular el transport de radiació a través de la matèria. Aquests mètodes tenen en compte la geometria completa del problema, la composició dels materials i la seua precisió ve determinada pel model físic implementat. No obstant, la natura estadística dels mètodes de Monte Carlo dona una contribució ineludible a la incertesa. Per tal de disminuir la incertesa estadística associada, és necessari augmentar el nombre d'iteracions o històries mostrejades, el que provoca que, en general, aquest tipus de càlcul siguin llargs, fet que limita el seu ús pràctic a l'àmbit clínic. No obstant, permeten calcular correccions i dades de forma precisa sense aproximacions. De fet, els avanços en les tècniques de Monte Carlo les han situat com a mètode estàndard de càlcul en diversos protocols.

A continuació descriurem l'estat de l'art dels dos protocols ja mencionats, sobre els que s'ha treballat al present document. Aquests estandarditzen la dosimetria en braquiteràpia (TG-43) i en feixos externs junt als aparells de mesura corresponents (TRS-398).

1.1 Dosimetria en braquiteràpia

Centrant-nos a la part de braquiteràpia, a l'any 1995, es va publicar el TG-43 [3], on es defineix el formalisme que s'ha establert com a estàndard internacional per a dosimetria en braquiteràpia en qualsevol de les seues modalitats, tant en alta com en baixa energia o taxa de dosi. Aquest formalisme, com es descriurà a les seccions 2.1 i 2.2, es basa en distribucions de dosi en aigua, el que pot donar lloc a grans diferències dosimètriques al transformar la deposició de dosi a teixit humà, especialment a baixes energies i en materials amb un Z elevat. Tot i això, el TG-43 ha sigut crucial per unificar la dosimetria en braquiteràpia a nivell mundial.

Posteriorment, s'han desenvolupat algorismes capaços de considerar la composició dels teixits i la geometria específica de cada implant en els càlculs dosimètrics en braquiteràpia. Aquests, estan basats tant en mètodes Monte Carlo [7, 8] com en mètodes deterministes [9, 10]. Arrel d'aquest desenvolupament en els algorismes, en 2012 es publica l'informe del grup de treball 186 (TG-186) [11], en el qual es revisen aquestes tècniques més avançades en el càlcul de dosi en braquiteràpia. Al TG-186 es proporcionen recomanacions que, a l'inici d'aquesta tesi, no es troben en els documents de les societats professionals i van dirigides als usuaris dels algorismes mencionats, coneguts com algorismes de càlcul de dosi basats en models (*Model-Based Dose Calculation Algorithms (MBDCA)*).

Com remarca el TG-186, la introducció dels Sistemes de Planificació de Tractament (SPT) basats en MBDCA en un entorn clínic representa una gran càrrega de treball per als físics mèdics, ja que la correcta validació de les noves tècniques d'aquests algorismes és molt costosa. Actualment, el procediment correcte a seguir per a validar-los consisteix en que cada físic mèdic, de forma independent, modele el sistema de planificació del tractament MBDCA amb uns casos de prova amb diferent geometria, font, aplicador, materials, etc, i que els compare amb els resultats d'aquests mateixos casos simulats amb un codi Monte Carlo validat, els quals són considerats el mètode de càlcul estàndard. Aquest és un procés costós i poc pràctic a llarg termini per a la comunitat de físics mèdics. A més, no és factible validar l'aplicació del SPT basat en MBDCA per a totes les possibles combinacions de font, aplicador i geometria degut a l'alt cost computacional requerit. Per tant, buscar les limitacions dels SPT basats en MBDCA és una tasca molt important per als usuaris que els empren en tractaments clínics.

Pels motius descrits, el TG-186 recomanà la creació d'un grup de treball que genere i registre casos de prova validats per a SPTs basats en MBDCA per tal que es posen a disposició dels usuaris. D'aquesta tasca s'encarrega actualment el *Working Group on Model-Based Dose Calculation Algorithms in Brachytherapy (WGDCAB)*⁶, el qual ha sigut creat per la AAPM amb la col·laboració de la ESTRO i el *Australasian Brachytherapy Group (ABG)*.

1.2 Dosimetria en radioteràpia de feixos externs

Al cas de dosimetria amb feixos externs, al 1996 es presenta un projecte coordinat per la IAEA amb l'objectiu de produir un codi de pràctiques internacional basat en estàndards de dosi absorbida en aigua. Aquest donà lloc al TRS-398 [4], que es va desenvolupar entre el 1997 i el 1999 i va ser avalat per la WHO, la PAHO i la ESTRO. El codi de pràctiques presentat supleix la necessitat d'un formalisme sistemàtic, internacional i unificat

⁶http://aapm.org/org/structure/default.asp?committee_code=WGDCAB

per a la calibració de cambres d'ionització en termes de dosi absorbida en aigua, i l'ús d'aquests detectors en la determinació de la dosi absorbida en aigua emprant feixos de radiació en l'àmbit de la radioteràpia. Més encara, el codi desenvolupat al TRS-398 ha proporcionat un formalisme unificat i consistent per a físics mèdics i, en general, per a la comunitat de radioteràpia. Com a conseqüència, s'ha aplicat a hospitals arreu del món on es realitzen tractaments oncològics a pacients.

Entre les dades incloses al TRS-398, trobem recomanacions per emprar valors experimentals dels factors de qualitat dels feixos. No obstant, aquestes dades experimentals no sempre estan disponibles. Aleshores, els valors es calculen emprant la teoria de la cavitat, on els poders de frenat es calculen a partir de simulacions Monte Carlo basades en treballs previs. D'altra banda, els factors correctors pertorbatius de les cambres s'obtenen a partir d'experiments, simulacions Monte Carlo o altres tipus de càlculs, inclús, de vegades, es prenen com la unitat.

Donat que el TRS-398 ha quedat en alguns punts desactualitzat, actualment s'està treballant en una revisió d'aquest [12]. Entre els motius d'aquesta actualització cal destacar, per als objectius d'aquest treball, la incorporació de noves cambres d'ionització al formalisme i l'ús de tècniques Monte Carlo de transport de radiació en matèria com a tècnica per a calcular quantitats dosimètriques per a tots els tipus de feixos, superant amb aquest mètode moltes de les aproximacions emprades per a determinar les dades proporcionades en el TRS-398 original. De nou, els avanços en les tècniques Monte Carlo, que permeten la simulació detallada tant de les cambres d'ionització com de les fonts de radiació, deixen les aproximacions considerades prèviament com obsoletes. Els detalls de com realitzar aquest tipus de càlcul els veurem a la secció 2.4.

El procediment per actualitzar dites dades emprant simulacions Monte Carlo consisteix en combinar dades de diferents grups independents arreu del món emprant diferents codis de simulació. Aquests grups, comptaran amb la geometria detallada de cada cambra proporcionada pel propi fabricant. Amb aquesta informació i junt amb la caracterització de la font, ja siga com a espais de fase o com a espectres publicats, es realitzaran les simulacions amb una incertesa estadística objectiu del 0.1% o inferior.

En aquesta línia, al present document es detalla un treball (secció II-3) la contribució del qual s'ha inclòs en aquestes dades i, per tant, constitueix una aportació a l'actualització del TRS-398.

1.3 Limitacions del Monte Carlo

Com s'ha discutit, les simulacions de Monte Carlo s'han posicionat com a estàndard en els càlculs de dosimetria. No obstant, actualment continuen tenint un ús limitat en la pràctica clínica quotidiana i queden relegats al

càlcul de correccions i verificacions tant de tractaments com d'altres mètodes aproximats de càlcul. El principal motiu d'aquesta limitació és l'elevat cost computacional requerit per a aconseguir les incerteses estadístiques recomanades per a la pràctica clínica. De fet, en alguns dels treballs presentats a aquest document s'han emprat aproximadament 700 cores i més de 4 mesos de càlcul per a poder aconseguir la incertesa del 0.1% requerida al TRS-398. Tot i que en la pràctica clínica no es requereix una incertesa tan baixa, el temps de càlcul continua sent prohibitiu per a molts tractaments. A més, aquests tractaments necessiten ser reajustats durant la planificació, el que encara augmentaria més el temps de còmput.

Per aquest motiu el treball final presentat a aquest document es centrà en el desenvolupament d'un codi Monte Carlo, basat en PENELOPE, paral·lel i fàcilment extensible per a poder realitzar aquest tipus de càlculs d'una forma més eficient. Tot i que encara dista de poder emprar-se en l'àmbit clínic, es continua treballant en el seu desenvolupament i actualment proporciona una millora substancial a l'eficiència de les simulacions.

1.4 Objectius

Donat el context, els objectius d'aquesta tesi es resumeixen a continuació. En primer lloc, centrat en les limitacions del TG 43 en tractaments de braquiteràpia, s'estudiarà tant la influència com la correcció de l'efecte de les variacions de les fluències energètiques de fotons. Per a dur a terme l'objectiu, es consideraran un conjunt de teixits humans d'interès clínic.

En segon lloc, s'avaluaran els factors correctors pertorbatius, i els desplaçaments dels punts efectius de mesura, de la cambra d'ionització pla-paral·lela PTW34013 junt als aplicadors VA i LFVA, els quals són necessaris per a obtenir els valors dosimètrics per al seu ús clínic.

Tot seguit, es calcularan els factors correctors de qualitat del feix requerits per actualitzar les dades del protocol internacional TRS 398. Per dur-ho a terme, es caracteritzaran una sèrie de cambres d'ionització cilíndriques, actualment emprades per a ús clínic, fabricades per PTW (Freinburg, Alemanya). L'estudi es centrarà en dosimetria en feixos de fotons de l'ordre del MV.

Finalment, donats els llargs temps de còmput requerits per a dur a terme els objectius anteriors, es desenvoluparà un programa optimitzat per a l'execució de simulacions de Monte Carlo de transport de radiació. Aquest, es basarà en la llibreria PENELOPE i pretén proporcionar un entorn altament paral·lel i flexible per a l'execució de les simulacions esmenades.

2 Protocols

A continuació es descriuran els protocols emprats en el desenvolupament dels treballs presentats al capítol II. Aquests són, com ja s'ha introduït, el TG-43 i el TRS-398.

2.1 Formalisme del TG-43

A finals del segle XX, van aparèixer un gran nombre de publicacions i estudis sobre la dosimetria de les fonts de braquiteràpia. Aquests estudis, presentaven diferents estàndards de calibració de les fonts, diferents formalismes per al càlcul de dosi en teixits i distints protocols de caracterització de les fonts. Degut a aquest problema, la comunitat de física mèdica, es va trobar en una situació de confusió a l'hora d'escollir les fonts per als tractaments i el protocol dosimètric. Aquest fet va ocasionar que, al 1988, el comitè de teràpia radiativa de la AAPM, constituïra el ja mencionat TG-43, encarregat de revisar totes aquestes publicacions. La seua finalitat era establir un formalisme dosimètric i un conjunt de dades per als valors dels paràmetres dosimètrics emprats en aquest àmbit. Al 1995, es va publicar el formalisme dosimètric de la AAPM TG-43 [3], que ha sigut actualitzat posteriorment en diferents publicacions [13, 14, 15, 16]. El TG-43 defineix de manera clara les quantitats físiques necessàries en dosimetria, com el *kerma strength*, la funció radial de dosi, la funció d'anisotropia o la constant de taxa de dosi, entre altres. A més, fa una revisió detallada de les fonts més emprades en braquiteràpia com ^{125}I , ^{192}Ir i ^{103}Pd . Encara hui en dia, el TG-43 és l'estàndard de dosimetria en braquiteràpia que es segueix arreu del món. En el que resta d'aquesta secció, es descriurà breument l'esmenat formalisme així com els paràmetres que el defineixen.

El formalisme presentat al TG-43, es restringeix a modelitzar fonts amb simetria cilíndrica. A més, descriu la distribució de dosi com una funció bidimensional emprant coordenades esfèriques sobre un sistema amb origen al centre de la part activa de la font. L'esquema del sistema, està representat a la figura I.3, on r és la distància entre el centre de la font i el punt d'interès, i θ és l'angle respecte a l'eix longitudinal de la font. Amb aquesta geometria, la taxa de dosi es pot escriure com,

$$\dot{D}(r, \theta) = S_k \Lambda \left[\frac{G(r, \theta)}{G(r_0, \theta_0)} \right] g(r) F(r, \theta) \quad (\text{I.6})$$

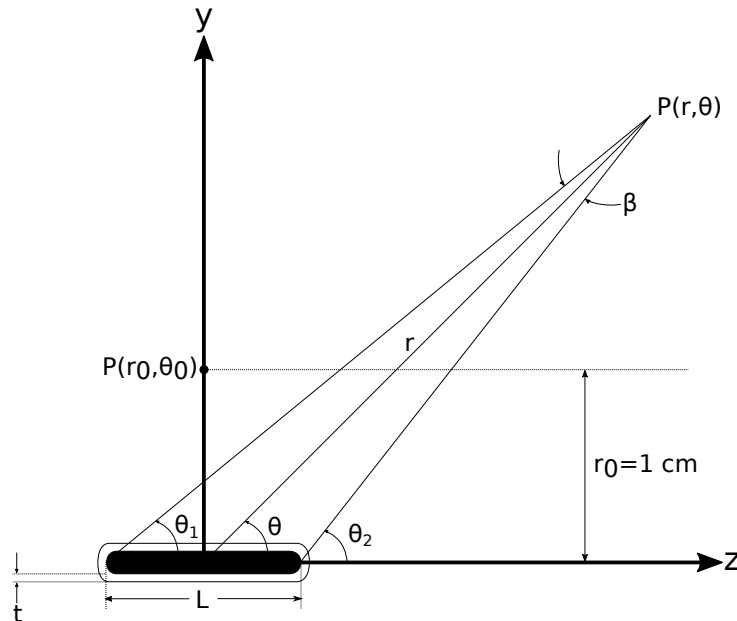


Figura I.3: Esquema de la geometria assumida per al formalisme del càlcul de dosi.

on S_k és l'anomenat *air kerma strength* de la font, que s'expressa en unitats de $\text{cGy} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{h}^{-1} \equiv U$, Λ representa la constant de taxa de dosi (en $\text{cGy} \cdot \text{h}^{-1} \cdot U^{-1}$), $G(r, \theta)$ és un factor geomètric de la font, $g(r)$ la funció radial de dosi, i, finalment, $F(r, \theta)$ la funció d'anisotropia. D'altra banda, (r_0, θ_0) denota el punt de referència. Tots aquests paràmetres són comuns per a fonts d'un mateix model, a excepció del S_k que és el que diferencia les fonts i, per tant, el valor a mesurar per l'usuari. A continuació es definiran aquestes magnituds.

1. Punt de referència per als càlculs de dosi

El punt de referència (r_0, θ_0) s'elegeix de tal forma que es situa a la bisectriu transversal de la font i a una distància d'1cm del seu centre, és a dir, $r_0 = 1\text{cm}$ i $\theta_0 = \pi/2$. Aquesta elecció del punt de referència té a veure amb pràctiques que ja s'empraven en el càlcul de dosis.

2. Air kerma strength (S_k)

El S_k és una mesura de la taxa de kerma en aire, en un punt sobre l'eix transversal a la font, i mesurada al buit. El que significa que es mesura, idealment, en un volum d'aire suficientment menut com per a considerar-se puntual, i, entre el volum detector i l'emissor, el medi és buit. Per la simetria cilíndrica, es sol emprar un anell d'aire prim com a volum detector. D'altra banda, s'han de corregir els efectes d'atenuació i dispersió ocasionats pels medis situats entre l'emissor i el volum detector. Aquest, es defineix com,

$$S_k = \dot{K}_\delta(d)d^2 \quad (\text{I.7})$$

on $\dot{K}_\delta(d)$ és la taxa de kerma en aire mesurada en el buit, en un punt a una distància d sobre la bisectriu transversal de la font. S'ha de tindre en consideració, que la distància d ha de ser suficientment gran com per a que la font pugui ser considerada, matemàticament, com una font puntual. A partir d'aquest punt S_k és independent de la distància, tot i que, típicament, aquesta distància de calibració sol fixar-se a $d = 1\text{m}$. D'altra banda, el valor de δ determina el llindar d'energia per baix del qual s'exclouen els fotons de baixa energia a l'hora de calcular el kerma. L'objectiu d'aquest llindar, és eliminar la contribució dels fotons que incrementen el valor de $\dot{K}_\delta(d)$ sense contribuir de forma significativa a la dosi dipositada en el teixit a distàncies majors de 0.1cm . Un exemple d'aquests fotons "contaminants" són els raigs característics originats en les capes externes d'acer o titani de la càpsula de la llavor.

Per recomanacions del TG-32 [17], es prenen les unitats del kerma, el temps i la distància en μGy , h i m respectivament, el que atorga al S_k resultant unitats de $\mu\text{Gym}^2\text{h}^{-1}$. Aquestes unitats es defineixen amb el símbol U, anomenant-les unitats de *air kerma strength*.

$$1\text{U} = 1 \mu\text{Gy m}^2 \text{h}^{-1} = 1 \text{cGy cm}^2 \text{h}^{-1} \quad (\text{I.8})$$

3. Constant de taxa de dosi (Λ)

La constant de taxa de dosi, es defineix com la taxa de dosi en aigua a una distància d'1 cm en l'eix transversal de la font, per unitat de S_k de la font en un maniquí d'aigua, com es mostra a l'equació I.9. Comunament, aquest maniquí s'anomena fantoma (de l'anglès *phantom*). El medi que es pren de referència en el report del TG-43 és l'aigua líquida, tant per a per la definició de Λ que és una quantitat absoluta, com per als paràmetres de distribució de dosi relativa.

$$\Lambda = \frac{\dot{D}(r_0, \theta_0)}{S_k} \quad (\text{I.9})$$

Les unitats de Λ són $\text{cGyh}^{-1}\text{U}^{-1}$ que es redueixen a cm^{-2} . Aquest paràmetre, inclou efectes de la geometria de la font, de la distribució espacial de la radioactivitat al seu interior, de la interacció amb els materials de la font i de l'encapsulament, i de la dispersió en aigua al voltant de la font. A més, el seu valor, depèn de l'estandardització de les mesures en les que S_k ha estat calibrada.

4. Factor geomètric ($G(r, \theta)$)

Aquesta magnitud corregeix la dependència espacial de la deposició de dosi causada, únicament, per la distribució espacial de l'activitat a l'interior de la font. Ignora tant l'absorció com dispersió dels fotons a l'interior d'aquesta. Es defineix com,

$$G(r, \theta) = \frac{\int_V [\rho(r')dV'/|r' - r|^2]}{\int_V \rho(r')dV'} \quad (\text{I.10})$$

on $\rho(r')$ representa la densitat de radioactivitat al punt $p(r') = p(x', y', z')$ a l'interior de la font, i V denota el seu volum. No obstant, com que la distribució tridimensional de l'activitat ($\rho(r)$) és desconeguda en alguns casos, al TG-43 s'opta per aproximar la font a una línia per tal d'obtenir $G(r, \theta)$. Si la font pot aproximar-se a un punt o a una línia de longitud L , $G(r, \theta)$ es simplifica a les expressions següents,

$$G(r, \theta) = r^{-2}, \text{ aproximació de fonts puntuals} \quad (\text{I.11})$$

$$G(r, \theta) = \begin{cases} \frac{\beta}{Lr \sin \theta}, & \theta \neq 0 \\ (r^2 - L^2/4), & \theta = 0 \end{cases}, \text{ fonts aproximades a línies}$$

on L és la longitud de la part activa de la font, i β l'angle subtendit per aquesta i el punt (r, θ) (figura I.3). Per tant, $G(r, \theta)$ modelitza la distribució de dosi relativa afectada únicament per la distribució espacial de la radioactivitat, ignorant els efectes d'absorció i dispersió tant a l'interior de la font com al medi que l'envolta.

5. Funció radial de dosi ($g(r)$)

Aquesta funció, defineix la caiguda de taxa de dosi al llarg de l'eix transversal deguda a l'absorció i dispersió en el medi, i ve definida de la següent manera,

$$g(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta_0)G(r_0, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)G(r, \theta_0)} \quad (\text{I.12})$$

La funció $g(r)$ pot veure's influenciada també per la filtració de fotons pels materials tant de la font com del seu encapsulament.

6. Funció d'anisotropia ($F(r, \theta)$)

La funció d'anisotropia, considera l'anisotropia de la distribució de dosi al voltant de la font, indicant quant es diferencia respecte a la distribució de dosi d'una emissió puntual ($F = 1$). A aquesta,

s'inclouen tant els efectes d'absorció com de dispersió en el medi. Es defineix com,

$$F(r, \theta) = \dot{D}(r, \theta)G(r, \theta_0) / \dot{D}(r, \theta_0)G(r, \theta) \quad (\text{I.13})$$

i dona la distribució angular de la variació de taxa de dosi per a cada distància deguda al pas de la radiació per la càpsula i en el medi. En aquesta, el factor geomètric s'empra per a suprimir la influència de la dependència amb la inversa del quadrat de la distància en la distribució de dosi. Açò suavitza el gradient de dosi, sobretot en zones properes a la llavor, i permet una interpolació més precisa de les taules.

2.2 Limitacions del TG 43

Actualment, la majoria dels sistemes de planificació en braquiteràpia utilitzen el formalisme descrit al TG-43 per estimar la dosi dipositada. Aquestes planificacions, consisteixen en la superposició de les distribucions, precalculades, de dosis d'una única font dins d'un medi infinit d'aigua. Per a cada llavor, es té en compte la seua posició i el temps de permanència en eixa ubicació. Aquest mètode és ràpid i pràctic en la clínica, però no té en compte efectes com la influència de les heterogeneïtats del teixit i dels aplicadors de les fonts, l'atenuació produïda entre les llavors i, les dimensions finites del pacient. Tot açò provoca que les assumpcions del TG-43 per al càlcul de dosi, com l'existència d'EPC, no siguen completament vàlides en algunes situacions clíniques com tractaments de lesions en mama o pulmó [18, 19, 20, 21, 22]. Com a conseqüència, les condicions necessàries per aplicar la teoria de cavitats grans i convertir així la dosi dipositada en aigua en dosi dipositada en teixit poden, en general, no acomplir-se. De fet, [23] en 2009 conclou en una revisió de la literatura existent que els paràmetres de dosi acceptats a la clínica poden estar sobreestimats o subestimats, com a mínim, en un 5%, arribant inclús fins a un factor 10. No obstant, gràcies a la pràctica clínica i l'experiència, les taxes de curació són elevades (majors que un 80% en cèrvix i pròstata). El principal problema de les incerteses mencionades es deu als òrgans de risc propers a la zona a tractar. Al no discriminar per teixit, no es pot estimar correctament la radiació que rebran i, per tant, els efectes secundaris derivats.

En aquelles situacions on es combinen l'existència de fotons de baixa energia, per sota de 100 keV, amb teixits amb una Z elevada, com l'os, les limitacions del TG-43 són evidents [24]. L'efecte fotoelèctric és aleshores la interacció predominant, donant lloc a una elevada absorció dels fotons de baixa energia i endurint així l'espectre de fotons a mesura que aquest aprofundeix en el pacient [25].

2.3 MBDCA

Per tal de superar les limitacions del TG 43 (secció 2.2), al TG 186 [11], com s'ha dit, es proposen els MBDCAs com a possible solució, ja que són capaços de modelitzar el sistema complet de forma més precisa. Entre ells, es consideren els mètodes de Monte Carlo com l'actual estat de l'art en dosimetria computacional. No obstant, aquest tipus d'algorismes introdueix una complexitat afegida als SPT, ja que, per tal de tindre en compte tots els efectes de dispersió i heterogeneïtats, és necessària una descripció detallada tant de la geometria del pacient, com dels aplicadors i fonts emprades, i dels materials involucrats. Aquesta informació ha de proporcionar-se per a cada element de la geometria a considerar en el càlcul de la dosi dipositada, per exemple, en cada vòxel d'una imatge creada a partir d'una Tomografia Computeritzada (TC). De fet, per als MBDCAs, les imatges de TC solen formar part de les dades d'entrada per al càlcul de la distribució de dosi, així com la informació dels aplicadors, blindatges i fonts. Òbviament, el resultat final obtingut a partir del MBDCA dependrà fortament tant de la imatge, i per tant de l'escàner emprat, com de la descripció dels aplicadors i fonts, pel que poden sorgir discrepàncies depenent de com s'han obtingut les dades d'entrada. És per aquest motiu que el TG 186 proporciona unes pautes específiques per tal de disminuir aquestes discrepàncies, com, per exemple, les composicions recomanades a emprar per als teixits humans involucrats en tractaments o la forma d'assignar material i densitat a cada element de la geometria.

A continuació es descriuen breument alguns d'aquests algorismes emprats per a braquiteràpia. Una descripció més detallada així com recomanacions per a fer la transició del formalisme del TG 43 als MBDCAs descrits es pot trobar al TG 186.

Collapsed-cone superposition/convolution method (CC)

El mètode CC es basa en la superposició de kernels. Aquests, es construeixen a partir de la discretització angular (cons) de la distribució espacial d'energia dipositada pels fotons dispersats i les partícules secundàries carregades [9] en un medi de referència. La superposició té lloc a la malla on es vol calcular el transport de la radiació. A aquesta tècnica, es solen emprar dos tipus de kernels, un primer per a la dosi primària, i un segon per a la dispersada. En el cas de càlculs en braquiteràpia, s'aproxima la dosi primària al kerma, i s'empra aquesta per a calcular la component dispersada [10, 26, 27, 28]. Una vegada calculats al medi de referència, típicament aigua, per tal de tractar les heterogeneïtats en els materials, s'empren tècniques de traçat de rajos per escalar ambdós tipus de kernels [27, 29]. Aquest mètode està implementat al SPT comercial ACE (*Advanced Collapsed-Cone Engine*), desenvolupat per Nucletron (Elekta, Veenendaal, Països Baixos),

que es va incloure a 2003 com a part del seu SPT Oncentra Brachy v4.4 [30].

Solucions deterministes de l'equació lineal de transport de Boltzmann

Per resoldre l'equació lineal de transport de Boltzmann (ELTB), un mètode està consisteix en emprar un mallat de l'espai de fase, el que dona solucions aproximades que convergeixen a la solució continua en el límit per a mallats molt fins [31]. Aquests mètodes empen una discretització espacial, angular i energètica donant com a resultat un sistema d'equacions lineal que es resol de forma iterativa. Comercialment, aquest mètode es troba implementat al SPT Acuros, desenvolupat per *Varian Medical Systems* (Palo Alto, CA).

Simulacions de Monte Carlo

Els mètodes basats en simulacions de Monte Carlo, resolen la ELTB mitjançant el mostreig aleatori del transport de la radiació. Com s'ha mencionat, és considerat l'estàndard en l'estat de l'art en dosimetria computacional, fet pel qual s'emprarà al llarg d'aquest treball i s'explicarà amb més detall a la secció 3.

Tots els MBDCAs presentats tenen distintes fonts d'incertesa. Als mètodes de Monte Carlo, les incerteses estadístiques disminueixen en augmentar el nombre d'històries, mentre que les incerteses sistemàtiques venen donades per altres factors, com el desconeixement de les seccions eficaces, incerteses en els plànols dels dispositius, desconeixement en la composició dels materials, etc. Respecte als mètodes de resolució de l'ELTB, les incerteses sistemàtiques venen donades per la discretització espacial, angular i energètica. Finalment, els mètodes basats en CC, presenten fonts d'incertesa tant per la discretització angular dels kernels, com per les aproximacions a l'hora de calcular les contribucions de radiació dispersa o l'escalat emprat per a tractar les heterogeneïtats en els materials.

A més, tots els mètodes anteriors es veuen afectats per fonts d'incertesa externes, com poden ser el tamany finit de la malla on es calcula la distribució de dosi o les incerteses en les composicions i densitats dels materials emprats.

Tot i que els mètodes de Monte Carlo i els basats en la resolució de l'ELTB són similars, ja que, teòricament, convergeixen a la mateixa solució, les limitacions de l'ELTB per a geometries complexes [32] converteix al Monte Carlo en un mètode més versàtil i genèric.

2.4 Correccions sobre mesures en cambres d'ionització

Per tal de poder convertir la dosi mesurada als diferents tipus de cambres d'ionització en dosi absorbida en el medi on s'ha introduït, no és suficient

aplicar la teoria de la cavitat, ja que els elements d'aquesta, com les parets de la cambra, l'elèctrode o simplement el canvi de material de la cavitat afecten a la mesura.

Per a l'ús d'aquestes cambres en dosimetria, cal calibrar-les per tindre en compte aquestes pertorbacions. El procediment a seguir es detalla als protocols, TRS 381 [33] i TRS 398 [4], els quals suggereixen emprar un medi d'aigua, o equivalent, per realitzar dit calibratge, i expliquen detalladament el procediment de caracterització de les cambres i els mètodes de mesura. En aquests, la correcció de les mesures s'aplica mitjançant els anomenats factors de correcció. Existeixen diferents tipus d'aproximacions a l'hora d'implementar aquests factors de correcció pertorbatius en el mètode de càlcul de dosi absorbida. El més senzill i, a més, amb menor probabilitat d'introduir errors, consisteix en corregir la dosi absorbida a una certa posició ($D(z)$), mesurada al punt efectiu de mesura de la cambra (P_{eff}), amb un factor global (p_c) que incloga totes les correccions [4]. Aquest punt efectiu es troba, habitualment, a l'interior de la cavitat de la cambra i determina la posició on la cambra efectua la mesura de dosi. El factor global p_c és el resultat de multiplicar totes les correccions pertorbatives que afecten a la mesura de la cambra, cadascuna de les quals inclou un efecte concret,

$$p_c = \prod p_i \quad (\text{I.14})$$

on p_i denota cadascuna de les correccions pertorbatives aplicades a la mesura. Segons el seu origen, alguns d'aquests factors són, p_{des} , que inclou el desplaçament sobre el punt efectiu de mesura degut a la presència de la cambra, p_{paret} , que corregeix l'efecte de les diferències entre els materials de la paret i el medi, i p_{fl} que corregeix la pertorbació de la fluència de fotons, que difereix entre el medi i el gas de la cavitat.

Introduir aquests factors correctors, modifica la relació entre les dosis dels dos medis, modificant la relació entre dosis per a cavitats grans (equació I.5), a la mostrada en l'equació I.15.

$$\frac{D_w(z)}{D_g(z)} = \frac{\overline{(\mu_{en}/\rho)_w}}{\overline{(\mu_{en}/\rho)_g}} \cdot p_c \quad (\text{I.15})$$

Com s'ha dit, el factor corrector p_{des} , corregeix el desviament entre el P_{eff} proporcionat pel fabricant i el punt on realment es pren la mesura a l'interior de la cavitat de la cambra. No obstant, es pot optar per afegir un desplaçament al punt de mesura i eliminar aquest factor de les correccions [34], definint així la nova correcció global com,

$$p'_c = \frac{1}{p_{des}} \prod p_i = \frac{p_c}{p_{des}} \quad (\text{I.16})$$

En aquest cas, el punt on realment s'està mesurant la dosi en el medi no serà z , sinó que estarà desplaçant una quantitat ΔP_{eff} , quedant la relació entre dosis com,

$$\frac{D_w(z + \Delta P_{eff})}{D_g(z)} = \frac{\overline{(\mu_{en}/\rho)_w}}{\overline{(\mu_{en}/\rho)_g}} \cdot p'_c \quad (I.17)$$

Per obtenir les factors correctors d'ambdues aproximacions, en primer lloc, el factor p_c es pot obtenir a partir d'una mesura com,

$$p_c = \frac{D_w(z)}{D_g(z) \left(\overline{(\mu_{en}/\rho)} \right)_{w,g}} \quad (I.18)$$

on $\left(\overline{(\mu_{en}/\rho)} \right)_{w,g}$ representa el quocient dels coeficients mitjans d'absorció massics del medi i el gas de la cavitat respectivament.

D'altra banda, el coeficient p'_c , junt al desplaçament ΔP_{eff} , es pot obtenir a partir de la minimització de la distribució de χ^2 , creada a partir d' N posicions, definida com $\chi^2 = \sum_{i=1}^N (f_i - p)^2 / \Delta f_i^2$, on

$$f_i = \frac{D_w(z_i + \Delta P_{eff})}{D_g(z_i) \left(\overline{(\mu_{en}/\rho)} \right)_{w,g}} \quad (I.19)$$

i s'assumeix que tant els factors correctors com el desplaçament són independents de la posició z .

2.4.1 Dependència amb el feix

Els factors correctors descrits per corregir les mesures de les cambres d'ionització, en general, dependran fortament del feix de radiació que deposita la dosi. Per aquest motiu, s'introdueix el concepte de qualitat del feix (Q), que ens permetrà relacionar els factors correctors per a una mateixa cambra emprada en diferents feixos de qualitats diferents. La metodologia per a calcular i assignar aquests factors de qualitat, a un feix determinat, dependrà tant del tipus de partícula primària del feix com de la seua energia. Donat que a d'aquest treball s'estudien els feixos de fotons d'alta energia, a la secció 2.4.2 es descriurà com calcular els corresponents factors. Descriuim, en primer lloc, la dosi dipositada en aigua en una profunditat de referència z_{ref} , per a un feix de referència de qualitat Q_0 , en absència de cambra, com,

$$D_{w,Q_0} = M_{Q_0} N_{D,w,Q_0} \quad (I.20)$$

on M_{Q_0} és la lectura del dosímetre sota condicions de referència i N_{D,w,Q_0} és el factor de calibratge per transformar la mesura M_{Q_0} a dosi absorbida en

aigua en aquestes condicions. Noteu que totes les magnituds s'han obtingut per a un feix de referència de qualitat Q_0 . El problema apareix quan pretenem prendre mesures sota un feix diferent a l'emprat en el calibratge, amb una qualitat $Q \neq Q_0$. En aquest cas, s'hauria de repetir tot el procés de calibratge per a les característiques del nou feix, no obstant, no totes les instal·lacions estan preparades per a dur a terme aquesta tasca ni resulta una metodologia pràctica. A més, se li suma la dificultat de reproduir feixos amb la mateixa qualitat que els produïts en acceleradors clínics [35]. Per solventar-ho, s'introdueix el factor k_{Q,Q_0} que relaciona els factors correctors calculats per a un feix de referència de qualitat Q_0 amb un feix de qualitat Q . Amb aquest factor, podem escriure la dosi depositada a aigua per a un feix de qualitat Q com,

$$D_{w,Q} = M_Q N_{D,w,Q_0} k_{Q,Q_0} \quad (\text{I.21})$$

on la mesura del dosímetre M_Q es corregeix emprant els mateixos coeficients correctors emprats al feix de referència (N_{D,w,Q_0}). Per tant, el factor corrector k_{Q,Q_0} es defineix com el quocient dels factors de calibratge per a les qualitats Q i Q_0 en termes de la conversió a dosi absorbida en aigua a partir de la mesura de la cambra d'ionització,

$$k_{Q,Q_0} = \frac{N_{D,w,Q}}{N_{D,w,Q_0}} = \frac{D_{w,Q}/M_Q}{D_{w,Q_0}/M_{Q_0}} \quad (\text{I.22})$$

Idealment, k_{Q,Q_0} deuria mesurar-se directament per a cada combinació de cambra i qualitat de feix Q . Com ja s'ha dit, no resulta una metodologia pràctica i, en el passat, k_{Q,Q_0} es calculava teòricament emprant la teoria de la cavitat. Posteriorment, amb l'avanç de la computació, es va proposar un mètode alternatiu emprant simulacions de Monte Carlo detallades [36]. El càlcul, consisteix en obtindre la dosi absorbida en un punt de referència en dos casos. En primer lloc, la dosi en aigua $D_{w,Q}$, que s'aproxima a un volum molt menut. D'altra banda, la dosi mitjana absorbida en el volum actiu de la cambra d'ionització $D_{air,Q}$ situant el seu P_{eff} al punt de referència. Amb aquestes magnituds, podem calcular k_{Q,Q_0} com,

$$k_{Q,Q_0} = \frac{D_{w,Q}/D_{air,Q}}{D_{w,Q_0}/D_{air,Q_0}} \quad (\text{I.23})$$

Cal remarcar que per obtindre una mesura precisa del k_{Q,Q_0} amb mètodes de Monte Carlo, és necessària una descripció detallada de la geometria de la cambra d'ionització i els seus materials, així com d'ambdós feixos involucrats. Aquests últims es proporcionen, usualment, com a espais de fase.

2.4.2 Índex de qualitat del feix

Depenent del tipus de partícula i l'energia d'aquesta, el TRS 398 proporciona unes pautes per tal de calcular l'índex de qualitat d'un feix. Donat que en aquest treball s'han estudiat els feixos de fotons de l'ordre del megavolt (MV), a aquesta secció descriurem la metodologia per calcular l'índex de feixos de fotons d'alta energia, el qual s'aplica per al rang d'energies compreses entre 1 i 50 MeV.

El TRS 398 especifica el factor de qualitat Q d'un feix de fotons d'alta energia en termes del *Tissue Phantom Ratio* ($TPR_{20,10}$). Aquest, es defineix com el quocient de dosi absorbida a una profunditat de 20 i 10 cm en un fantoma d'aigua, mesurada a una distància constant font-cambra (SCD) de 100 cm i una dimensió del camp de radiació de 10 cm \times 10 cm al pla de la cambra. El motiu principal pel qual s'empra l'índex TPR, és perquè, a eixes profunditats, el feix incident no es veu afectat per la contaminació d'electrons. D'aquesta manera, es proporciona també una mesura del coeficient d'atenuació efectiu, que descriu la disminució de la corba de dosi en profunditat, més enllà del màxim de deposició de dosi [37, 38, 39]. Aquesta corba presenta una disminució quasi exponencial amb la profunditat del fantoma.

Totes aquestes consideracions es mostren a l'esquema de la figura I.4, que mostra el disseny experimental necessari per mesurar el $TPR_{20,10}$.

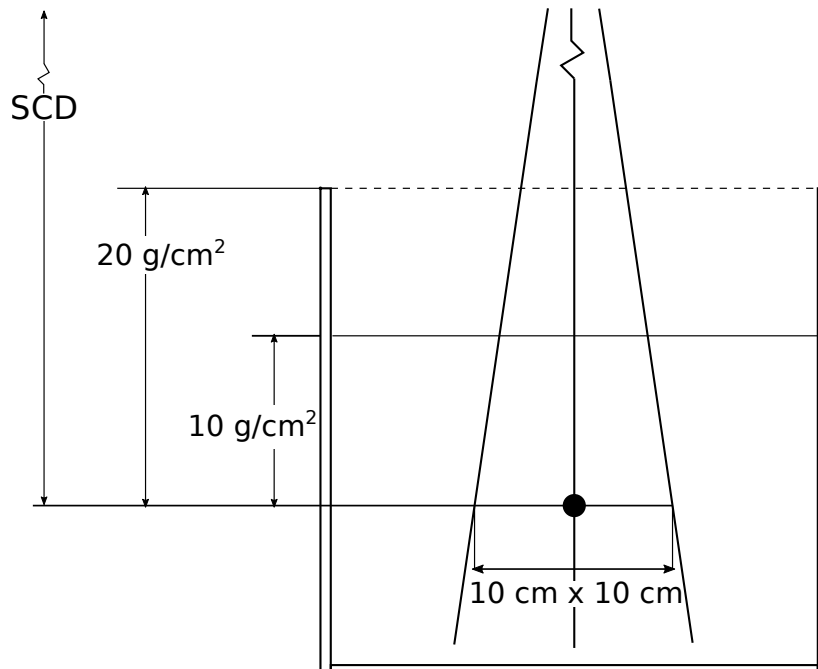


Figura I.4: Dispositiu experimental per a la mesura de l'índex de qualitat Q ($TPR_{20,10}$) d'un feix de fotons d'alta energia.

Al formalisme, es considera que dos feixos amb el mateix $\text{TPR}_{20,10}$, independentment de la seua forma o distribució d'energia, tenen el mateix efecte dosimètric. Dita suposició és una bona aproximació per a feixos de fotons amb energies de l'ordre del MV, tot i que continua verificant-se per a nous acceleradors sense filtre aplanador [40].

En referent als elements de mesura, en primer lloc, es recomana que s'empren cambres d'ionització cilíndriques per a realitzar les mesures de dosi de referència. Aquestes, hauran de disposar d'una cavitat amb un volum d'entre 0.1 i 1 cm^3 , per tal d'acomplir un compromís entre la sensibilitat i la capacitat de prendre mesures en un punt de l'espai. Per a cambres cilíndriques, açò es tradueix en una cavitat d'aire amb un diàmetre intern no major de 7 mm i una altura menor de 25 mm. A l'hora d'emprar-la, la cambra s'ha d'alinear de manera que la fluència del feix siga aproximadament uniforme en tota la secció eficaç de la cavitat de la cambra. Aquesta condició limita la dimensió mínima del camp de radiació que es va a mesurar. Finalment, per a cambres cilíndriques, cal remarcar que el punt de mesura es considera al centre de la cavitat de la cambra, tot i que com hem vist a la secció anterior, aquest es pot veure desplaçat a causa dels factors pertorbatius que afecten la mesura. Per tant, el centre de la cavitat deu situar-se sobre el punt de mesura.

En referència als fantomes, tal i com recomana la IAEA, l'aigua és el medi de referència recomanat pel TRS 398. Aquests, es deuen estendre, com a mínim, 5 cm més enllà dels quatre costats de la secció del feix més ample que va a emprar-se. Aquesta distància s'ha de calcular a la profunditat on va a tindre lloc la mesura. A més, s'ha de deixar un marge de 5 g/cm^2 a partir de la màxima profunditat de mesura. Al parlar de distàncies en g/cm^2 , ens referim al producte del gruix (en cm) per la densitat del material (en g/cm^3). Açò s'anomena gruix equivalent en aigua, i s'empra per a poder transformar les distàncies en aigua a altres materials emprats als fantomes, com plàstics.

3 Simulacions de Monte Carlo

Tal i com s'ha mencionat, l'eina que s'ha emprat per a realitzar els càlculs pertinents als treballs presentats al capítol II són els mètodes de Monte Carlo, els quals descriurem tot seguit.

El transport de radiació a través de la matèria ha sigut un tema d'interès des del principi del segle XX. En aquesta, les partícules incidents al material sofreixen múltiples interaccions transferint la seua energia als àtoms i molècules del material i produint partícules secundàries. Aquesta successió d'interaccions origina una cascada de partícules que, al seu torn, es transportaran i interaccionaran amb el medi.

Descriure l'evolució d'aquestes cascades requereix coneixements sobre les propietats del transport de radiació. Aquesta descripció és necessària per a un gran nombre d'aplicacions, per exemple, en espectroscòpia electrònica [41] [42], de positrons [43], microscòpia electrònica [44], etc. També és necessària per al disseny i ús de detectors de radiació [45, 46]. Finalment, en l'àmbit mèdic, les simulacions de Monte Carlo s'empren tant per al disseny d'escàners [47, 48, 49], com per a dosimetria i radioteràpia [50, 51], àmbit en el que es centra aquest treball.

Inicialment, la descripció del transport de la radiació es va descriure amb l'equació lineal de transport de Boltzmann. No obstant, degut a les seues limitacions [32], a finals del 1950, i gràcies als avanços en computació, es van desenvolupar mètodes de Monte Carlo com a alternativa per a resoldre els problemes de transport. Donada la natura aleatòria de l'evolució de les cascades, les simulacions de Monte Carlo resulten ser un mètode eficaç per a descriure-les.

Des d'aleshores, s'han desenvolupat diferents codis per executar aquest tipus de simulacions, alguns d'ells són PENELOPE [52, 7], GEANT4 [8], EGS5 [53, 54, 55], MCNP [56] i FLUKA [57]. No obstant, per als treballs presentats a aquest document s'ha optat per emprar PENELOPE, degut a que tracta de forma precisa la física de les interaccions d'electrons, fotons i positrons en el rang d'energies emprades en física mèdica, implementa un millor formalisme per a les interaccions electromagnètiques d'electrons i positrons, es gratuït i de codi obert i, finalment, el seu codi font es relativament simple comparat amb la resta d'opcions de codi obert.

3.1 PENELOPE

PENELOPE és un codi de propòsit general escrit en el llenguatge de programació FORTRAN. Està dissenyat per executar simulacions de Monte Carlo de transport d'electrons, fotons i positrons en sistemes materials construïts com a cossos homogenis amb una composició química arbitrària, dins del rang d'energies de 50 eV a 1 GeV. Aquest, implementa els models d'interacció més fiables disponibles actualment, tal i com s'ha comprovat comparant els seus resultats amb dades experimentals [58]. Es distribueix de forma lliure a la *Nuclear Energy Agency Data Bank*⁷ i a Amèrica del Nord pel *Radiation Safety Information Computational Center* del laboratori *Oak Ridge National Laboratory*⁸.

A PENELOPE, per tal d'obviar els efectes de difracció i simplificar la dependència angular de les interaccions, s'assumeix que la radiació es propaga en materials amorfs, homogenis i isòtrops.

⁷<https://www.oecd-neo.org/databank>

⁸<https://rsicc.ornl.gov>

La pèrdua d'energia i la dispersió angular després d'una interacció, venen descrites per la Secció Eficax Diferencial (SED) corresponent, la qual mesura la probabilitat de cada possible estat després de sofrir la interacció. Per calcular aquesta probabilitat, és necessari conèixer l'estat inicial de la partícula, el qual queda caracteritzat per la seua energia (E), posició (X, Y, Z) i direcció de moviment (U, V, W).

Les partícules, tant primàries com secundàries, sofriran interaccions calculades a partir d'un procés probabilístic. En aquest, es determinarà la distància de vol de la partícula abans de la següent interacció, el tipus d'interacció, l'energia perduda i el canvi en la direcció de moviment corresponent. El càlcul es realitza a partir de la generació de nombres pseudo-aleatoris i les distribucions de probabilitat descrites per les SED i derivades. Per a que la simulació del transport d'una partícula acabe, la seua energia haurà de ser menor que un llindar d'energia definit per l'usuari, anomenat energia d'absorció, com discutirem més endavant. També acabarà si la partícula escapa del sistema material definit a la simulació.

En tota simulació es defineixen, per l'usuari, una sèrie de característiques per a les partícules inicials, com espectre d'energia, distribució espacial, distribució de direcció etc. Típicament, cadascuna de les partícules inicials genera, el que s'anomena, una història, la qual inclou tant la partícula inicial com totes les partícules secundàries produïdes per les interaccions d'aquesta, o relaxacions atòmiques conseqüència d'una ionització. Aquestes s'emmagatzemen a una pila LIFO (de les sigles en anglès *Last In First Out*) per a ser simulades quan acabe el transport de la partícula actual. Al final de la simulació, les mesures, com dosi depositada, espectres d'energia, etc, es recullen en comptadors i solen donar-se els seus valors mitjans i desviacions estadístiques normalitzats per història.

A continuació es descriuran breument els diferents models d'interacció considerats a PENELOPE i es discutiran els diferents paràmetres de simulació associats a aquestes. No obstant, es pot trobar una discussió completa al manual de PENELOPE [7] i també en [59].

3.1.1 Interaccions electró-positró

1. **Dispersió elàstica d'electrons i positrons:** En una interacció elàstica, l'estat quàntic inicial i final de l'objectiu (l'àtom o molècula involucrat) són iguals. Aquest tipus d'interacció modifica la direcció de moviment del projectil i transmet una certa quantitat d'energia del projectil a l'objectiu, el que causa el retrocés d'aquest últim. En PENELOPE, es simulen emprant SED numèriques obtingudes a partir del programa ELSEPA [60, 61].
2. **Col·lisions inelàstiques d'electrons i positrons:** En col·lisions inelàstiques l'objectiu passa a un estat excitat, és a dir, part de l'ener-

gia cinètica del projectil es transfereix als electrons atòmics. D'altra banda, el projectil canvia la seua direcció de moviment però amb un angle menor que al cas elàstic. Aquestes interaccions estan modelitzades a PENELOPE a partir de la SED de Born per a ones planes obtinguda a partir del model de *Sternheimer–Liljequist generalized oscillator strength* (GOS) [62, 63], incloent les correccions per efecte de densitat. Les energies de ressonància estan escalades per reproduir l'energia d'excitació mitjana recomanada pel report 37 de la ICRU [64].

3. **Ionització de capes internes per impacte d'electrons i positrons:** PENELOPE simula la ionització de capes internes (capa K i subcapes L, M i N) i les corresponents emissions de radiació fluorescent (electrons Auger i raig-x) tractant-les com a col·lisions inelàstiques amb una secció eficaç total calculada numèricament per Bote i Salvat [65], on s'empra la primera aproximació de Born d'ona distorsionada (DWBA) amb el potencial auto-consistent de Dirac-Hartree-Fock-Slater [66]. Açò s'aconsegueix fixant la secció eficaç total de les col·lisions dels electrons amb cada capa interna a la secció eficaç de DWBA, i renormalitzant la secció eficaç total de les capes externes per mantindre el valor del poder de frenat de col·lisió. L'energia perduda i la deflexió angular segueixen el model de GOS.
4. **Emissió de Bremsstrahlung per electrons i positrons:** L'emissió de fotons de bremsstrahlung es dona quan el projectil és accelerat en el camp electromagnètic de l'objectiu. Per a electrons i positrons d'alta energia, aquest és el mecanisme dominant de pèrdua d'energia. Per a calcular l'energia del fotó emès, s'empra un espectre numèric d'energia perduda obtingut de les taules de seccions eficaces de Seltzer i Berger [67, 68]. D'altra banda, la distribució angular dels fotons emesos, es simula emprant l'expressió analítica descrita a [69], amb els paràmetres determinats a partir de l'ajust de les distribucions angulars calculades amb el programa *BREMS* de Poskus [70].
5. **Aniquilació de positró:** L'aniquilació d'un electró amb un positró es simula emprant les SED de Heitler [71] per a aniquilacions en vol de dos fotons amb electrons lliures en repòs. Com que els efectes de lligam de l'electró objectiu no estan considerats, les aniquilacions d'un únic fotó no es tenen en compte.

3.1.2 Interaccions de fotons

1. **Dispersió coherent de fotons (Rayleigh):** En aquest tipus d'interaccions, els fotons són dispersats per electrons lligats a l'àtom sense

produir excitació del seu estat. Com a conseqüència, l'energia del fotó incident i resultant és la mateixa. En PENELOPE, la dispersió coherent de fotons es simula a partir de les SED calculades emprant teoria de perturbacions no relativista en l'aproximació de Born [72], els factors necessaris de la qual s'obtenen de EPDL97 [73]. A més, es poden simular fotons amb polarització descrita a partir dels paràmetres de Stokes.

2. **Dispersió incoherent de fotons (Compton):** En aquest cas, el fotó col·lisiona amb un electró atòmic que l'absorbeix i emet un fotó secundari amb diferent energia i direcció de moviment. Aquesta interacció es simula a partir de les SED calculades emprant l'aproximació d'impuls relativístic amb els perfils analítics de Compton per a un electró. Aquest mètode té en compte tant l'efecte de lligam de l'electró com l'efecte Doppler [74]. Anàlogament al coherent, PENELOPE pot simular fotons amb polarització descrita amb els paràmetres de Stokes.
3. **Efecte fotoelèctric:** En aquesta interacció, el fotó és absorbit per l'àtom i aquest passa a un estat excitat en el procés. Per a simular-la, s'empren les SED calculades amb el programa PHOTACS emprant teoria de perturbacions a primer ordre [75] i incloent les correccions proposades per Pratt [76].
4. **Producció de parells electró-positró:** Un fotó amb una energia major que un cert llindar pot ser absorbit al camp electromagnètic d'un nucli o electró i convertir la seua energia en massa en forma de partícules, conservant energia, moment i càrrega elèctrica. Al primer cas, quan s'interacciona amb el camp d'un nucli, es crea un parell electró-positró. En canvi, si la interacció té lloc amb un electró, aquest últim sofreix un retrocés i s'observen tres partícules resultants (producció de triplets). En PENELOPE, la secció eficaç total per a la producció de parells i triplets s'obté a partir del programa XCOM [77].

3.1.3 Relaxació atòmica

En PENELOPE, s'assumeix que, tant les interaccions inelàstiques dures amb capes atòmiques internes, l'absorció per fotoelèctric i la dispersió Compton, ionitzen l'àtom objectiu. La relaxació causada per les vacants produeix l'emissió isòtropa de raig-x característics i electrons Auger. Aquests són simulats per la subrutina RELAX emprant les probabilitats de transició de les vacants a capes externes i les energies dels electrons Auger donades per la *Evaluated Atomic Data Library of Perkins et al.* [78]. D'altra banda, les energies dels raig-x s'obtenen de [79] i [80].

3.1.4 Estructura del programa principal

Per a poder executar simulacions amb la llibreria PENELOPE, és necessari un programa principal que gestione les cridades a la llibreria, controlant la geometria, l'evolució de les històries i extraient la informació rellevant de la simulació.

Entre els més emprats, trobem el programa principal proporcionat al propi paquet original de PENELOPE, anomenat `penmain` i el PenEasy, basat en la mateixa llibreria. Tot i que existeixen diferents programes principals basats en PENELOPE, comparteixen una estructura bàsica, la qual es detalla al manual original [7] i que a continuació descriurem breument.

PENELOPE s'estructura de forma que el recorregut d'una partícula es compon a partir d'una seqüència de segments, en els quals la partícula es mou lliurement i anomena *jumps*. Al final de cada segment, la partícula sofreix una interacció en el medi, procés al que anomena *knock*. Durant aquesta es perdrà energia, canviarà la seua direcció i/o es produiran partícules secundàries. Per a aconseguir aquesta estructura, s'empren un conjunt de rutines bàsiques,

- **CLEANS**: Inicialitza la pila de partícules secundàries, on s'emmagatzemen.
- **START**: S'empra quan comença el recorregut d'una nova partícula o es creua una interfície. És únicament necessària per a electrons i positrons ja que reinicialitza el transport condensat, que es discutirà més endavant.
- **JUMP**: Determina la longitud del pròxim segment fins a la pròxima interacció. Permet especificar una distància màxima per als segments d'electrons i positrons a partir del paràmetre *DSMAX*, com discutirem més endavant.
- **KNOCK**: Simula un event d'interacció, calculant la nova energia i direcció de moviment de la partícula. A més, guarda els estats de les partícules secundàries produïdes si es donara el cas.
- **SECPAR**: Extrau el següent estat de la pila de partícules secundàries i l'elimina d'aquesta.
- **STORES**: Guarda l'estat d'una partícula a la pila de partícules secundàries.

Amb aquestes rutines, l'estructura general de la simulació d'una cascada s'executa conforme mostra la figura I.5, a la qual N indica el número d'història, N_{total} el nombre objectiu d'històries a simular, \mathbf{r} i $\hat{\mathbf{d}}$ la posició

i direcció normalitzada de la partícula, respectivament, i DS la distància calculada pel JUMP. L'esquema s'explica a continuació.

En primer lloc, es fixa l'estat inicial de la partícula primària. S'executa la rutina CLEANs per inicialitzar la pila de secundàries i START per inicialitzar la simulació del recorregut. Tot seguit, la rutina JUMP determina la distància que recorrerà la partícula fins a la següent interacció. En el cas de que el segment creue una interfície, la partícula es para en la intersecció amb aquesta i es produeix el canvi al nou material, on es tornarà al START. Si la interfície limita la geometria i, per tant, la partícula escapa d'aquesta, la simulació del recorregut de la partícula acaba i s'intentarà extraure la següent partícula en la pila de secundàries. Si pel contrari no s'ha creuat cap interfície, es mou la partícula la distància determinada pel JUMP en la seua direcció de moviment i a continuació la rutina KNOCK simularà la pròxima interacció. Si la partícula és absorbida al material, s'intentarà simular la següent secundària, sinó, es tornarà al pas del JUMP. Cada vegada que s'extraga l'estat d'una partícula secundària de la pila, el programa tornarà al pas del START. Si la pila estiguera buida, es generarà una nova partícula primària o acabarà la simulació, depenent de si el nombre objectiu de partícules primàries simulades s'ha acomplert o no.

3.2 Classe II i paràmetres de simulació

A aquesta secció es descriuran els paràmetres de simulació emprats per PENELOPE, així com l'algorisme de transport mixt que empra (Classe II).

PENELOPE empra un algorisme mixt de transport que depèn d'uns límits angulars i energètics. La selecció d'aquests paràmetres pot millorar substancialment l'eficiència de la simulació, reduint així les incerteses estadístiques amb un temps de còmput menor. A la taula I.1 es recopilen els paràmetres de simulació requerits per PENELOPE, els quals es discutiran a continuació.

Tal i com la majoria de codis de Monte Carlo, PENELOPE finalitza el transport de partícules quan la seua energia cinètica disminueix per baix del límit definit per l'usuari (E_{abs}). En aquest punt es considera que la partícula ha sigut absorbida al material i que diposita la seua energia cinètica localment. En el cas dels positrons, a més, al ser absorbits es produeix la seua aniquilació, emetent-se els dos fotons corresponents. El paràmetre E_{abs} ha de ser especificat per a cada tipus de partícula i cada material de la geometria. Com es d'esperar, tant el nombre de partícules secundàries com el temps de simulació augmenta al disminuir el valor de l' E_{abs} , pel que es convenient estudiar el valor òptim per a cada simulació. Per ajustar aquest paràmetre, cal tenir en compte, especialment, la distància recorreguda per les diferents partícules a eixa energia.

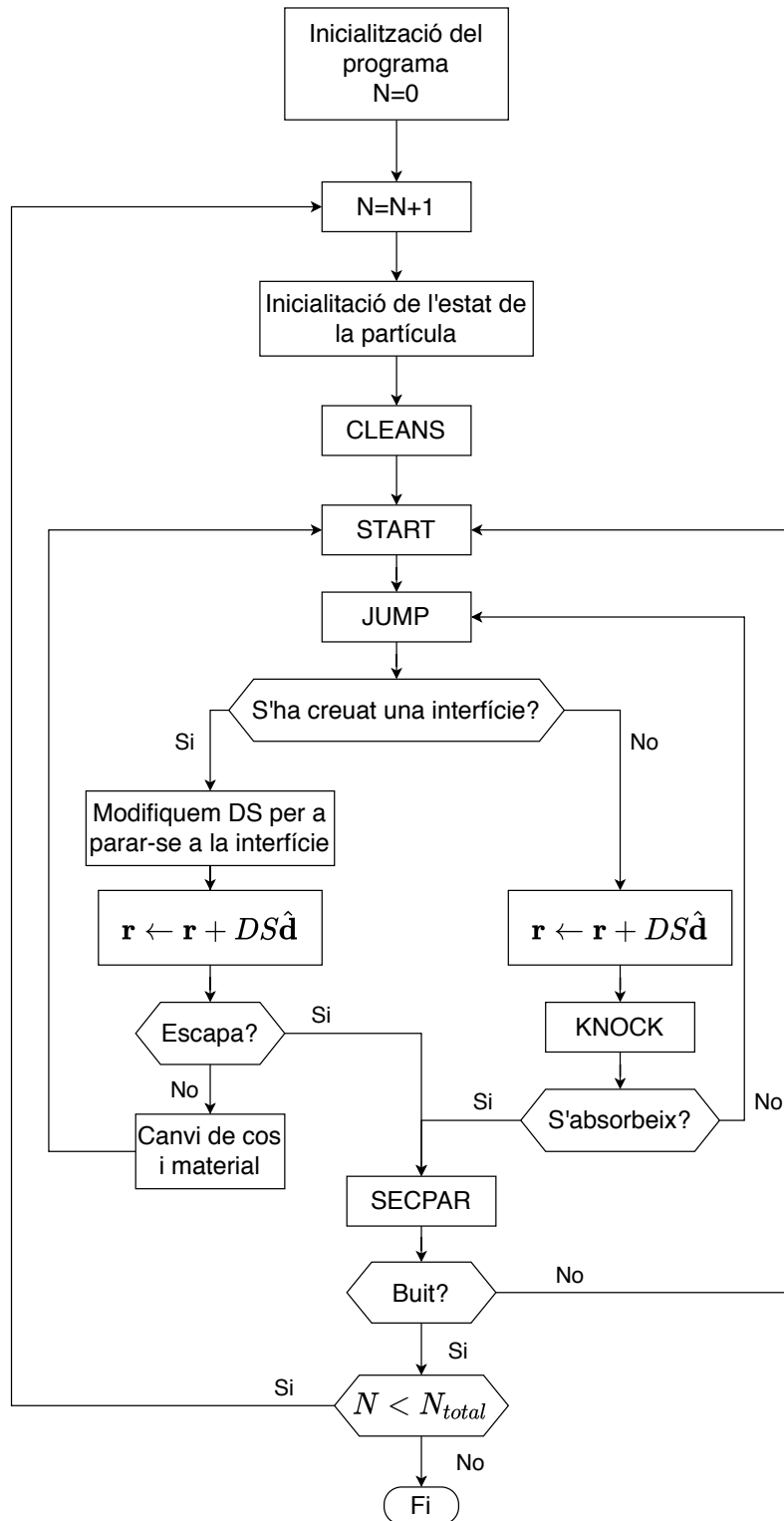


Figura I.5: Esquema bàsic del funcionament d'un programa principal basat en PENELOPE.

Paràmetre	Descripció	Rang	Valors recomanats
E_{abs}	Energia d'absorció per tipus de partícula i material en eV	$E_{abs} \geq 50$ eV	$\text{rang}(E_{abs}) < L_{\text{bin}}$ Emprar execucions curtes per a trobar el valor òptim de E_{abs}
C_1	Desviació angular màxima	$[0, 0.2]$	~ 0.05 Emprar execucions curtes per a trobar el valor òptim de C_1
C_2	Fracció màxima de pèrdua d'energia	$[0, 0.2]$	~ 0.05 Emprar execucions curtes per a trobar el valor òptim de C_2
W_{cc}	Llindar d'energia perduda, en eV, per a col·lisions dures inelàstiques	$[0, E_{abs}(e^-)]$	$\min(5 \text{ keV}, \frac{1}{100}E)$
W_{cr}	Llindar d'energia perduda, en eV, per a emissions dures de radiació de bremsstrahlung	$[10 \text{ eV}, E_{abs}(\gamma)]$ Si $W_{cr} < 0$ la radiació feble queda desactivada	$\min(5 \text{ keV}, \frac{1}{100}E)$
s_{max}	Recorregut màxim en cm	$s_{max} \geq 0$	$\sim 1/10$ del mínim gruixut del cos

Taula I.1: Paràmetres de simulació de PENELOPE. Tot i que els valors recomanats pretenen proporcionar un compromís entre velocitat i precisió, la seua influència deuria estudiar-se per a cada cas particular. En general, augmentant el valor dels paràmetres s'aconsegueixen execucions més ràpides, però a costa d'una possible disminució en la precisió.

Per exemple, si volem obtindre una distribució espacial de deposició de dosi en una malla, les energies d'absorció deuriem seleccionar-se de forma que les partícules depositen tota la seua energia en una distància relativa-

ment menuda en comparació a les dimensions dels elements de la malla. En altres casos és recomanable fer execucions curtes augmentant el valor de l' E_{abs} per trobar el millor compromís entre velocitat i precisió [7].

Tant els electrons com els positrons, sofreixen un gran nombre d'interaccions abans de ser absorbits al material. Per aquest motiu, les partícules carregades reben un tractament diferent al de les partícules neutres, com els fotons, els quals són simulats interacció a interacció de forma detallada. Executar simulacions detallades amb electrons i positrons sols és factible si el nombre d'interaccions és suficientment menut, és a dir, per a energies cinètiques baixes o làmines fines. La solució emprada tant a PENELOPE com a altres codis de Monte Carlo, consisteix en estimar l'efecte combinat de totes les interaccions amb el material, ocorregudes en una distància predefinida. Amb aquest mètode, el transport de les partícules estarà format per una successió de segments aglutinants d'interaccions [81]. No obstant, per a que l'aproximació siga vàlida, els segments han de ser suficientment llargs per a assegurar que la partícula interaccionarà un gran nombre de vegades al llarg d'aquest. Pel que fa a l'energia perduda i la deflexió angular ocasionada per les interaccions en el segment, ambdós s'obtenen a partir del mostreig de teories de dispersió múltiple [82]. Aquesta tècnica és coneguda com simulació condensada o esquema de Classe I. No obstant, l'esquema de Classe I presenta alguns inconvenients.

En primer lloc, els desplaçaments espacials després d'un recorregut segueixen una distribució parcialment desconeguda. A més, com que les teories de dispersió múltiple són vàlides en medis infinits i homogenis, cal calcular la distància a les interfícies pròximes per a mantindre la longitud del segment suficientment menuda com per a no canviar el material on la partícula està propagant-se. Més encara, a mesura que la partícula s'acosta a una interfície, la longitud del segment ha de disminuir-se progressivament, el que restringeix el preseleccionar la dimensió del segment i limita els objectes que poden ser modelats de forma eficient. Per afrontar aquestes limitacions, alguns codis que empren l'esquema de Classe I, com [55, 83], opten per canviar a un mode de simulació detallat quan la partícula s'apropa a una interfície.

Una solució més pràctica es l'anomenat esquema mixt o de Classe II. En aquest, s'explota el fet que les SEDs per a les interaccions de partícules carregades d'alta energia decreixen ràpidament quan s'incrementa l'energia perduda W i l'angle de dispersió θ o la deflexió angular $\mu \equiv (1 - \cos \theta)/2$. Aquesta dependència va com μ^{-2} per a interaccions elàstiques, $\mu^{-2} W^{-2}$ per a col·lisions inelàstiques i com W^{-1} per a emissió per bremsstrahlung, i poden emprar-se per diferenciar dues categories d'interaccions, les dures i les febles, per a tractar cadascuna de forma independent i disminuir el nombre efectiu d'interaccions a simular. Amb aquest objectiu, es defineixen dos llindars dependents de l'energia: W_c , per a l'energia perduda, i

θ_c per a l'angle polar de dispersió. Amb aquests llindars, es consideraran interaccions dures a aquelles amb una pèrdua d'energia i angle polar de dispersió majors que W_c i θ_c respectivament, les quals es tractaran de forma discreta simulant-se individualment a partir del mostreig aleatori de les SEDs corresponents. D'altra banda, les interaccions amb W i θ menors que els llindars es consideraran interaccions febles, pel que la seua deflexió angular acumulada en el pas entre dues interaccions dures successives es comptabilitza segons les aproximacions de dispersió múltiple. Pel que fa a l'energia perduda, vindrà donada pel poder de frenat, el qual es considerarà constant en el pas entre interaccions fortes. Respecte al desplaçament espacial al final del segment, aquest es determina mitjançant l'algorisme del *random-hinge* [84]. En aquest, es computa l'efecte combinat de totes les interaccions febles entre dues interaccions dures successives, com una única interacció feble artificial, nomenada *hinge*, on es redueix l'energia de la partícula i és desviada de la seua trajectòria. Cal remarcar que les partícules secundàries generades com a conseqüència d'interaccions febles són menyspreades, pel que es considera que s'absorbeixen localment i no s'afegeiran a la pila per a ser simulades posteriorment. La posició d'aquest *hinge* es mostra de forma uniforme sobre la distància entre les dues interaccions fortes. Després del *hinge*, la partícula es mou la distància restant en la nova direcció, on tindrà lloc la pròxima interacció forta. Per tant, cada segment es divideix en dues parts separades pel *hinge*. Els beneficis d'aquest algorisme són que, en primer lloc, permet simplificar substancialment el codi de simulació i, a més, s'ha provat que proporciona valors precisos en els moments angular i espacial. Més encara, en la proximitat a interfícies, l'esquema de Classe II permet, simplement, truncar el segment. Una descripció més detallada de l'esquema de Classe II es pot trobar al manual del PENELOPE [7] i a [85].

A diferència de la majoria de codis Monte Carlo de propòsit general, en PENELOPE el transport d'electrons i positrons es realitza seguint l'algorisme de l'esquema mixt de Classe II per a totes les interaccions. Aquest esquema és més precís i estable numèricament que l'esquema de Classe I. Els paràmetres que resten per explicar, i que es discutiran a continuació, serveixen per a controlar l'esquema de Classe II.

Per determinar els valors llindars W_c i θ_c , PENELOPE empra quatre paràmetres de simulació, especificats per l'usuari, per a cada material de la geometria. La selecció d'aquests paràmetres tindrà una forta influència en la precisió i eficiència de la simulació, pel que es recomanable estudiar-los en cada cas.

Per a interaccions amb pèrdua d'energia, l'usuari ha d'especificar dos d'aquests paràmetres en eV: W_{cc} , per a les col·lisions inelàstiques, i W_{cr} per a les emissions de bremsstrahlung. Els processos corresponents amb una pèrdua d'energia W menor que el seu llindar es consideraran interaccions

febles. Al seu torn, els valors d'aquests paràmetres s'empraran internament per a calcular el recorregut lliure mitjà entre interaccions dures, és a dir, la distància mitjana entre dues interaccions dures amb pèrdua d'energia. S'ha de tenir en compte que aquests llindars tenen un efecte visible en l'espectre d'energia simulat i, per tant, es recomana que ambdós siguin menors que l'amplada del bin d'energia emprat. Amb aquesta precaució, els llindars afectaran de forma lleu a la precisió dels resultats. Una altra característica a tenir en compte és que, degut a la forta dependència de les SEDs de col·lisions inelàstiques i bremsstrahlung en funció de W , ambdós llindars afecten poc a la velocitat de simulació per a energies majors de 100 keV. D'altra banda, els valors de W_{cc} i W_{cr} , per consistència, deuen seleccionar-se menors que les corresponents E_{abs} en cada material. A més, valors alts dels llindars impliquen una major distància entre interaccions dures i, per tant, una menor quantitat de segments, el que pot afectar a la fiabilitat del mètode en objectes prims, com es veurà més endavant. Els valors recomanats per aquests llindars són el mínim entre 5 keV i un 1% de l'energia inicial de la partícula primària [7]. Aplicant aquests criteris s'assegura que el nombre d'interaccions dures és estadísticament suficient i que la velocitat de simulació no varia significativament si s'augmenten el valor dels llindars. Finalment, el valor de W_{cr} , al contrari que W_{cc} , no pot fixar-se a zero perquè les SEDs d'emissió per Bremsstrahlung divergeixen per energia nul·la dels fotons d'eixida. Per tal d'activar la simulació detallada d'aquests events, es pot assignar un valor negatiu a W_{cr} , el que forçarà que, internament, es redefinisca a 10 eV, ignorant els fotons amb una energia menor.

D'altra banda, els paràmetres C_1 i C_2 serveixen per a determinar el recorregut lliure mitjà entre interaccions dures elàstiques ($\lambda_{el}^{(h)}$), que, al seu torn, fixa el llindar en l'angle de desviament (θ_c). El primer, defineix, per a un segment amb longitud igual al recorregut lliure mitjà entre interaccions elàstiques dures, el limit superior per al desviament angular mitjà, $1 - \langle \cos \theta \rangle \leq C_1$. El segon, limita la fracció mitjana de pèrdua d'energia durant el segment, $\langle E_0 - E \rangle \leq C_2 E_0$. Incrementar aquests valors augmenta tant $\lambda_{el}^{(h)}$ com θ_c i, per tant, afecta al temps de còmput necessari per simular el transport de cada electró i positró. Més específicament, cada paràmetre té una major influència en la velocitat de simulació en rangs d'energia diferents. En el cas de C_1 , té un major pes en energies intermèdies, típicament menors de 10 MeV, on, en canvi, C_2 no té pràcticament influència sobre $\lambda_{el}^{(h)}$. D'altra banda, per a altes energies, la velocitat de simulació queda determinada per C_2 . Finalment, a baixes energies (< 10 keV) la simulació es realitza de forma detallada, ja que els recorreguts lliures mitjans de les col·lisions elàstiques i les dures coincideixen. Els valors recomanats per a C_1 i C_2 són menuts, típicament entre 0 i 0.05 i mai per dalt de 0.2. No obstant, es poden emprar valors majors després d'estudiar el seu efecte en

la precisió i la velocitat de la simulació mitjançant una sèrie d'execucions curtes.

Una de les dificultats d'emprar l'esquema de Classe II, és que, en principi, tant el desviament angular com el desplaçament lateral degut a les interaccions febles durant un segment de longitud s , ha de calcular-se a partir del mostreig de les distribucions de Lewis per a dispersió múltiple [82][86, 87]. No obstant, aquestes distribucions es calculen a partir d'expansions de Legendre i convergeixen lentament. A més, varien ràpidament amb s . La solució emprada a PENELOPE consisteix en explotar el fet de que aquestes distribucions angulars es comporten, aproximadament, com Gaussians quan la partícula interacciona 10 vegades o més. Per tant, no és necessari emprar la distribució exacta, sinó que s'empra una distribució gaussiana artificial amb els valors de mitjana i variància corresponents. Per al cas de la pèrdua d'energia per a interaccions febles, s'empra un plantejament anàleg. En aquest cas, la distribució que segueix la pèrdua d'energia ve donada per l'equació de transport de Landau [88], però si el nombre d'interaccions és suficientment gran, la distribució d'energia perduda es comporta, com abans, pràcticament com una Gaussiana. Emprant aquestes distribucions artificials, PENELOPE és capaç de simular de forma eficient i precisa les interaccions febles, sempre que la partícula interaccione un nombre suficientment gran de vegades.

Com ja s'ha mencionat, en algunes geometries, pot donar-se el cas de que les condicions necessàries per aplicar l'aproximació de simulacions condensades no s'acomplisquen. Per exemple, en cossos primos o en zones de dispersió enrere, el nombre d'interaccions dures que sofreix una mateixa partícula a un sol material és menut. Per a garantir que el nombre de segments a l'interior del material és suficientment gran, l'usuari ha de definir el paràmetre s_{max} per a cada material de forma convenient. Aquest paràmetre limita la longitud màxima del segment amb l'objectiu d'assegurar que el nombre de segments al material siga suficientment alt com per a que les aproximacions emprades siguin correctes. A part, també cal tenir en compte que les magnituds que defineixen les distribucions de dispersió múltiple, com els recorreguts lliures mitjans entre tipus d'interacció, depenen de l'energia de la partícula, la qual decreix durant el segment degut a les col·lisions febles. Per tal de tindre en compte aquesta variació, l'energia perduda deguda a interaccions febles ha de limitar-se, i, per aquest motiu, PENELOPE limita internament el valor màxim de s_{max} a quatre vegades el recorregut lliure mitjà de la interacció dura. En el cas de que la longitud del segment mostrejat siga major que s_{max} , aquest es truncarà afegint una interacció tipus *delta*, la qual no té ninguna influència més que parar la partícula i el flux del programa [83]. Per tant, en general, l'usuari únicament necessita especificar el valor de s_{max} si, per qüestions geomètriques, no està garantit que la partícula interaccione més de 10 vegades al material. Si no

és el cas, assignant un valor de s_{max} “infinit” es deixarà que PENELOPE l’ajuste internament [7].

Tal i com ja s’ha mencionat, els paràmetres E_{abs} , C_1 , C_2 , W_{cc} , W_{cr} i s_{max} determinen la velocitat de la simulació de manera que incrementar o disminuir qualsevol dels paràmetres, accelerarà o ralentitzarà la velocitat de simulació respectivament. No obstant, també determinaran la precisió de la simulació, pel que convé emprar valors relativament menuts. Un avantatge d’aquest esquema és que es poden realitzar simulacions detallades de les interaccions elàstiques i inelàstiques d’electrons i positrons ajustant els paràmetres W_{cc} , C_1 a C_2 a zero. D’altra banda, com ja s’ha explicat, per a simular detalladament la radiació de bremsstrahlung és suficient ajustar W_{cr} a un valor negatiu. Amb aquest mètode l’usuari pot verificar la influència dels paràmetres a cada simulació particular, comparant els resultats amb una simulació detallada.

3.3 Incerteses en simulacions Monte Carlo

Cal tenir especial cura amb el tractament de les incerteses en simulacions Monte Carlo, i és el que tractarem a continuació. No obstant, per a una descripció més detallada, el lector pot dirigir-se al manual del PENELOPE [7] i al treball de James sobre teoria del Monte Carlo [89].

3.3.1 Mitjanes i desviacions estadístiques de les mesures

Generalment, les magnituds a mesurar en una simulació Monte Carlo s’obtenen com a mitjana d’un gran nombre (N) d’històries simulades on es tenen en compte les contribucions tant de les partícules primàries, com de les secundàries produïdes. Cada magnitud (Q) es pot expressar com una integral amb la forma de l’equació I.24, i la seua variància com I.25,

$$Q = \int q(x)p(x)dx \quad (\text{I.24})$$

$$var_Q = \int q^2(x)p(x)dx - Q^2 \quad (\text{I.25})$$

on $p(x)$ representa la distribució de probabilitat de les variables aleatòries x que determinen la mesura $q(x)$. Tot i que, en problemes de transport de radiació, la distribució $p(x)$ sol ser desconeguda, la simulació de cascades individuals ens permet generar una successió de variables aleatòries x i la mesura $q(x)$ corresponent. En aquest cas, la distribució $p(x)$ descriu la cascada d’interaccions aleatòries de cada història, on cada tipus d’interacció segueix la seua pròpia distribució de probabilitat. Amb aquests elements, podem obtenir una estimació de Q a partir de la simulació Monte Carlo com,

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad (\text{I.26})$$

on q_i és la mesura de la i -èsima història simulada. Al seu torn, la desviació estàndard de Q ve donada per l'equació I.27,

$$\sigma_Q = \sqrt{\frac{\text{var}_Q}{N}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \bar{Q}^2 \right]} \quad (\text{I.27})$$

Per exemple, si el que s'està mesurant és l'energia dipositada per història, i s'han simulat N històries, l'estimador Monte Carlo d'aquesta magnitud ve donat per,

$$\bar{E}_{dep} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i \quad (\text{I.28})$$

on e_i és l'energia dipositada per totes les partícules, inicial i secundàries, de la i -èsima història. La desviació estàndard corresponent és,

$$\sigma_{E_{dep}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2 - \bar{E}_{dep}^2 \right]} \quad (\text{I.29})$$

Pel que és necessari guardar tant l'energia dipositada per totes les partícules d'una mateixa història (e_i) com els seus quadrats (e_i^2).

En el cas de que es pretenga mesurar una distribució continua d'una certa magnitud, la solució més simple consisteix en discretitzar la distribució i tractar-la com un histograma on la magnitud a mesurar és l'"altura" de cada línia. Si, per exemple, es pretén mesurar la distribució d'energia dipositada en profunditat, $D(z)$, per història, en l'interval (z_{min}, z_{max}) , el més simple és dividir la profunditat total en M intervals regulars. Definint ara $e_{i,j,k}$ com l'energia dipositada al l'interval espacial k , per la partícula j de la història i , l'energia dipositada a cada interval z per història incident ve donada per,

$$E_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_j e_{i,j,k} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,k} \quad (\text{I.30})$$

on s'ha definit,

$$e_{i,k} \equiv \sum_j e_{i,j,k} \quad (\text{I.31})$$

Al seu torn, la incertesa estadística en cada interval espacial ve donada per,

$$\sigma_{E_k} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i.k}^2 - E_k^2 \right]} \quad (\text{I.32})$$

La distribució Monte Carlo resultant d'aquesta mesura és una funció discontinua amb, en general, un nombre finit de discontinuïtats situades entre els M intervals.

Un dels principals aspectes a tindre en compte quan es tracta amb distribucions contínues és la mida de les particions. En primer lloc, si les particions són molt menudes, en general, a cadascuna es registrarà un menor nombre de mesures, el que augmentarà la incertesa estadística fins al punt d'amagar el resultat mesurat. D'altra banda, disminuir la mida de les particions també augmentarà el nombre de particions i , per tant, la memòria requerida per a guardar tant l'acumulació de les mesures en cada interval com els corresponents quadrats per a calcular la desviació estàndard. Depenent del nombre de particions i de les característiques del maquinari on s'execute la simulació, l'ús de memòria podria ser prohibitiu, sobretot en execucions on simulen històries de forma concurrent.

3.4 Reducció de variància

Com s'ha vist a la secció 3.3, els resultats de les simulacions obtingudes amb PENELOPE, tenen associada una incertesa estadística. Aquesta, ha de ser suficientment menuda com per a assegurar la fiabilitat dels resultats, però reduir-la requereix augmentar l'estadística en ordres de magnitud que, al seu torn, involucra augmentar significativament el temps de còmput. Per eixe motiu, PENELOPE implementa una sèrie de tècniques de reducció de variància que permeten assolir incerteses estadístiques menudes sense comprometre el temps de simulació, augmentant la seua eficiència. Malauradament, l'optimització d'aquestes tècniques depèn fortament de les condicions del problema a simular, pel que no existeixen regles generals que funcionen en tots els casos i s'ha d'estudiar per a cada cas concret. A més, cal tenir en compte que al aconseguir una millora en la incertesa d'una variable es pot produir un augment de la incertesa en una altra. Per aquests motius, la utilització de les tècniques de reducció de variància ha de fer-se de manera controlada sense subestimar el seu efecte global i no és recomanable quan es vulguen obtenir resultats del procés de transport.

En aquesta secció, es descriuen breument les tècniques més rellevants. Per conèixer amb més detall els mètodes de reducció de variància es pot consultar el manual de PENELOPE [7] i [90].

Les tècniques de reducció de variància reordenen l'equació I.24 per optimitzar la simulació. Als problemes de transport de radiació en la matèria, aquest objectiu s'acompleix assignant a cadascuna de les partícules de la

simulació un pes (w), la qual cosa modifica les equacions anteriors. Ara, $p(x)$ i $q(x)$ estan pesades de la següent manera: $p' = p/w$ i $q' = wq$ i les equacions es reescriuen com I.33 i I.34.

$$\begin{aligned}\overline{Q'} &= \int wq(x) \frac{p(x)}{w} dx = \int q'(x)p'(x) dx \\ \overline{Q'} &= \overline{Q}\end{aligned}\tag{I.33}$$

$$var'_Q = \int q'^2(x)p'(x) dx - \overline{Q'}^2 = \int wq^2(x)p(x) dx - \overline{Q}^2\tag{I.34}$$

Amb aquesta dependència de var'_Q amb w i escollint adientment els pesos amb les tècniques adequades, s'aconsegueix una variància menor que var_Q per a la variable Q a mesurar a la simulació.

- **Interacció Forçada (IF):** Cadascuna de de les diferents interaccions de la radiació amb la matèria, succeeix amb una certa probabilitat, depenent de l'energia, partícula, etc. Segons el problema d'estudi, és necessari un nombre considerable d'interaccions d'un cert tipus per obtenir resultats amb incerteses suficientment baixes. La tècnica d'interacció forçada, augmenta de manera artificial la probabilitat d'ocurrència del procés en qüestió, A , donant-se amb major freqüència que en el cas real. A PENELOPE, aquest mètode s'implementa de manera que, en la interacció A , es substitueix el recorregut lliure mitjà del cas real, dividint-lo per un factor $\lambda_{A,F} = \lambda/F$, amb $F > 1$. Així, entre cada parell d'interaccions A reals, s'obtindran, en mitjana, $F - 1$ interaccions A forçades. Per ser coherent, la implementació d'aquest mètode en PENELOPE, considera que les funcions de densitat de probabilitat per a la pèrdua d'energia i les deflexions angulars en les interaccions forçades, són les mateixes que en el cas real. Açò s'aplica també a les direccions en que s'emeten les partícules secundàries, si es produeixen. A més, es tenen en compte una sèrie de consideracions que s'expliquen a continuació:

- Les partícules primàries tenen assignat pes la unitat. D'altra banda, a aquelles partícules secundàries produïdes a causa d'una partícula amb pes w que sofreix un tipus d'interacció A , ja siga real o forçada, se'ls assigna un pes $w_s = w/F$, mentre que les secundàries resultants d'interaccions reals a les quals no s'aplica IF, reben un pes igual al pes de la seua partícula mare ($w_s = w$).
- Les partícules simulades, tenen un conjunt de variables d'estat que canvien al llarg de la simulació segons les interaccions que

sofreixen com l'energia i la direcció. No obstant, a interaccions on s'aplica IF, si la partícula sofreix una interacció de tipus A , només es modifica el seu estat si la interacció és real, en cas contrari, si és forçada, el seu estat roman constant. Per a determinar si la interacció és forçada, es té en compte que la probabilitat de sofrir una interacció de tipus A real és de $1/F$. Per tant, si un nombre aleatori generat aconsegueix que $\xi < 1/F$, es considerarà que la interacció és real.

- Les alteracions del medi, tals com la deposició d'energia o de càrrega, resultants d'interaccions on s'aplica IF, siguen reals o forçades, han de pesar-se a l'hora de ser registrades. El pes que se'ls aplica és $w' = w/F$, on w és el pes de la partícula abans de la interacció. En la resta d'interaccions, on no s'aplica IF, el pes a emprar és el propi de la partícula $w' = w$.

L'estimador de Monte Carlo Q obtingut per a les N històries d'una simulació, ve donat per la contribució de tots els comptatges de q pesats pel seu w corresponent, com es mostra a l'equació I.35, on j representa la contribució de les partícules secundàries generades per la partícula primària i -èssima,

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{ij} w_{ij} q_{ij} \quad (\text{I.35})$$

Al seu torn, la desviació estàndard de Q ve donada per l'equació I.36,

$$\sigma'_Q = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_i \left(\sum_j w_{ij} q_{ij} \right)^2 - \bar{Q}^2 \right]} \quad (\text{I.36})$$

Seguint aquestes expressions, les quantitats a mesurar relacionades amb interaccions forçades tindran una incertesa estadística reduïda en comparació amb la obtinguda per a la mateixa simulació sense aplicar IF, degut a l'augment en el nombre d'aquestes interaccions. S'ha de tenir en compte que altres quantitats augmentaran la seua incertesa, ja que part del temps de simulació està destinat a simular l'elevat nombre d'interaccions forçades. Tot i els beneficis d'aquesta tècnica en determinades ocasions, s'ha d'emprar amb cautela, ja que produeix una violació de la conservació de l'energia. Aquest efecte, es causa al modificar els pesos de les energies dipositades, degut a que la suma d'aquestes al llarg del transport de la partícula difereix de l'energia real que aquesta ha perdut en la seua trajectòria. El resultat d'aquesta violació de la conservació de l'energia és que els espectres de deposició d'energia en aquestes simulacions pateixen un biaix.

- **Divisió:** L'objectiu d'aquesta tècnica, és augmentar el nombre de partícules en certes regions d'interès on s'avaluaran els resultats de la simulació. D'aquesta manera, es destina major temps de còmput a simular el transport i interacció de partícules que sí contribueixen als comptatges de la magnitud a mesurar en una regió espacial determinada. Igualment que en les interaccions forçades, en la divisió també es redueix la variància de les mesures a partir de la modificació dels pesos de les partícules. El procés de divisió consisteix en augmentar el nombre de partícules en una zona i amb unes característiques determinades, dividint les partícules originals amb un pes w_0 en un nombre de partícules $D > 1$ amb una fracció del pes original assignat a cadascuna $w_d = w_0/D$. La mitjana i la desviació estàndard associada de les quantitats que es mesuren aplicant aquesta tècnica, venen donades per les equacions I.35 i I.36, respectivament. Tenint en compte com es calculen els pesos de les partícules que provenen de la divisió, els resultats de les simulacions en les que s'empra aquesta tècnica, romanen sense biaix. L'efectivitat de la divisió, depèn de l'experiència de l'usuari alhora d'emprar-la en cadascun dels problemes, ja que, com s'ha explicat a aquesta secció, no existeixen unes regles d'ús que funcionen per a tots els casos.
- **Ruleta russa:** Aquesta tècnica segueix el procés invers a la divisió, i s'empra també a les regions que són d'interès per a l'usuari. En aquest cas, quan una partícula es mou abandonant la regió d'interès, es mata amb una probabilitat donada per $M < 1$. En eixe cas, la partícula no continua simulant-se i per tant no contribueix als comptatges de les magnituds mesurades a la simulació. Si pel contrari, la partícula sobreviu, el seu pes augmenta un factor $1/(1 - M)$. La mitjana i desviació estàndard de les mesures, es calcula de la mateixa manera que en la divisió, amb les equacions I.35, I.36, deixant també la simulació sense biaix degut a l'aplicació d'aquesta tècnica. L'efectivitat de la ruleta russa, ve determinada també per l'experiència de l'usuari en la seua aplicació. Les tècniques de divisió i ruleta russa, solen utilitzar-se conjuntament per tal de maximitzar el temps de còmput emprat en el transport de partícules en una regió. A més, ambdues tècniques poden ser aplicades conjuntament amb interaccions forçades i altres tècniques de reducció de variància.

Evidentment, a més de les tècniques explicades en aquesta secció, existeixen altres mètodes que milloren la velocitat de les simulacions. Per exemple, explotar les possibilitats de les simetries del problema, simplifica substancialment la simulació i augmenta considerablement la seua velocitat.

3.5 PenEasy

PenEasy [91], ofereix un programa principal modular de propòsit general dissenyat per a emprar la llibreria PENELOPE. De la mateixa manera que PENELOPE, és un software lliure i gratuït que es pot descarregar directament de ⁹, i està escrit en FORTRAN. Per a dur a terme les simulacions amb penEasy, l'usuari ha d'especificar tota la informació necessària al programa a través d'un fitxer de text seguint el format especificat. Entre aquesta informació, es troben els paràmetres descrits a la secció 3.1. Tant la construcció de la geometria com els fitxers de materials emprats per penEasy s'introdueixen de la mateixa manera que en PENELOPE, fent ús de les bases de dades proporcionades. PenEasy, ofereix una sèrie de models de font que es poden aplicar a diferents situacions pràctiques així com comptadors de diferents magnituds d'interès i tècniques de reducció de variància que s'invoquen des d'un codi estructurat que empra les subrutines proporcionades per PENELOPE. A més, permet simular geometries voxelitzades, les quàdriques originals de PENELOPE i, inclús, una mescla d'ambdues.

PenEasy guarda els resultats de la simulació en fitxers independents per a cada comptador configurat per l'usuari al fitxer d'entrada de la simulació. A continuació es descriuen els comptadors emprats en les simulacions realitzades per dur a terme aquest treball.

- *'tallyFluenceTrackLength'* : aquest comptador s'empra per calcular l'espectre de fluència integrat a tot el volum del material declarat com a detector. Per obtenir aquest valor, es compta la distància recorreguda per cada partícula al detector en funció de la seua energia. Tot i que les unitats de fluència són partícules per secció d'àrea travessada, el resultat d'aquest comptador es presenta en segments d'energia. El nombre de segments i el rang energètic que aquests cobreixen, és especificat per l'usuari al fitxer d'entrada. Així doncs, el resultat és una magnitud diferencial en energia que, a més, està integrat al volum del detector (cm^3), de tal forma que les seues unitats són partícules cm/eV per història inicial.
- *'tallySphericalDoseDistribution'* : comptador emprat per al càlcul de dosi absorbida per història en segments entre un interval radial determinat ($r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$) que defineix closques esfèriques. Aquest interval i el nombre de segments, són definits per l'usuari al fitxer d'entrada, el qual ha de tenir en compte que els segments especificats són homogenis. Degut a la necessitat d'aquesta homogeneïtat, aquest comptador no pot emprar-se per a geometries voxelitzades, ja que els resultats en medis no homogenis són erronis. Els resultats es presenten en unitats de eV/g per història.

⁹<http://www.upc.edu/inte/downloads>

- *'tallyCylindricalDoseDistribution'*: aquest comptador s'empra per al càlcul de dosi absorbida de forma anàloga al tally anterior però per a un interval radial que defineix bins cilíndrics.
- *'tallyParticleCurrentSpectrum'*: el comptador d'espectre s'empra per a obtenir l'espectre energètic de les partícules que arriben al material especificat per l'usuari. En aquest s'especifica l'interval energètic de l'espectre i discrimina per tipus de partícula. Els resultats, com als casos anteriors, estan normalitzats per història.

4 Optimització

Com s'ha discutit a la secció 1, les simulacions Monte Carlo presenten un gran cost computacional que es tradueix, típicament, en execucions llargues, el que limita el seu ús en certes aplicacions. Per aquest motiu, a la secció que ens ocupa, discutirem diferents tècniques per tal d'optimitzar els codis Monte Carlo, les quals s'empraran a l'últim treball presentat. Les optimitzacions es centraran, en primer lloc, en la millora dels accessos a memòria, secció 4.1. Tot seguit, a la secció 4.2 es parlarà dels avantatges del paral·lelisme i les seues dificultats. Finalment a la secció 4.3 es discutiran tècniques per aconseguir un codi modular i extensible, amb un equilibri entre flexibilitat i eficiència.

4.1 Memòria cau

L'optimització de l'ús dels diferents nivells de memòria cau continua sent actualment un punt clau en el rendiment dels processadors moderns, estudiant-se tant la seua gestió [92], limitacions [93], models de predicció de les seues capacitats [94] [95] o formes d'optimitzar el seu ús [96] [97].

La motivació de l'ús de la memòria cau es deu a la diferència entre la velocitat de rellotge dels processadors, que és de l'ordre del GHz, i el temps requerit per accedir a la memòria principal (RAM), que pot suposar desenes de nanosegons. Donat que els accessos a memòria són molt comuns a la majoria de programes, el temps requerit podria produir un gran impacte a la velocitat d'execució del procés. Per evitar-ho, s'empra la memòria cau, la qual és una memòria amb una capacitat menuda però molt més ràpida que la memòria principal. De fet, la majoria de processadors moderns empen diferents nivells de memòria cau, sent més menudes i ràpides a mesura que s'apropen a les unitats de còmput (CPU). Aquestes, guarden les dades a les que s'accedeix amb major freqüència, permetent al processador obtenir-les ràpidament i limitar els accessos a la memòria principal. La figura I.6 mostra l'estructura típica per a un processador amb tres nivells de memòria

cau. En aquesta, l'últim nivell (L3) es comparteix entre els diferents cors del processador, mentre que la resta (L1 i L2) són d'ús privatiu del cor.

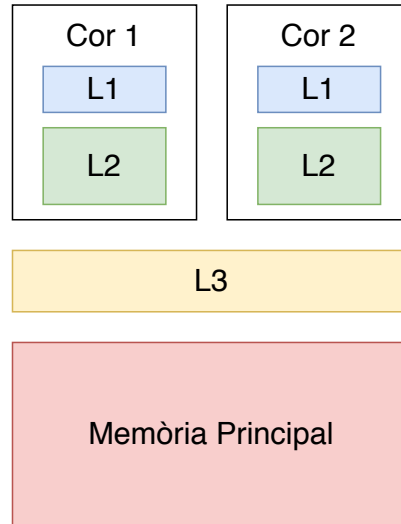


Figura I.6: Estructura típica de la jerarquia de memòries amb tres nivells de memòria cau.

La forma de determinar quines dades es guarden a la memòria cau és descriu a continuació. Quan el processador accedeix a una part de la memòria que no es troba ja descarregada a la memòria cau, aleshores, es descarrega en aquesta un bloc de memòria, a l'interior del qual es troba la direcció de memòria requerida pel processador. Aquests blocs de memòria són les anomenades línies de memòria cau. Si durant el procés de descàrrega d'una línia a la memòria cau, aquesta està plena, el processador decidirà quina línia substituir. Una política comuna als processadors moderns és la LRU (*Least Recently Used*), en la qual es substitueix la línia de memòria cau amb major temps sense ser accedida.

Aquest mecanisme, afavoreix estructurar les dades d'un programa per a que els càlculs successius que van a efectuar-se, empren elements ja descarregats a causa d'un accés anterior a la mateixa línia de memòria cau, evitant així un nou accés a la memòria principal. Alguns exemples coneguts de llibreries que exploten aquest tipus d'optimitzacions són el BLAS [98, 99] i llibreries que l'empren com el LAPACK [100].

Un exemple molt il·lustratiu i simple d'aquestes tècniques es pot mostrar a través d'operacions sobre matrius. Suposem per tant que volem sumar a cada element d'una matriu de dimensió $n \times n$ un valor igual al producte del seu índex de fila per l'índex de columna. A més, la matriu està guardada en memòria per files com un vector unidimensional, assegurant que tota ella està contigua en memòria. Per tant, per a obtenir l'element de la fila i i la columna j , accedirem a la posició $i \cdot n + j$. Per tal de recórrer i operar

sobre els elements de la matriu, tenim dues opcions. D'una banda podem recórrer la matriu per files, tal i com mostra el codi I.1, o per columnes, com nostra el codi I.2.

```

1  for(unsigned long i = 0; i < n; ++i)
2      for(unsigned long j = 0; j < n; ++j)
3          matrix[i*n+j] += i*j;

```

Codi I.1: Operació sobre els elements d'una matriu recorrent-la per files

```

1  for(unsigned long j = 0; j < n; ++j)
2      for(unsigned long i = 0; i < n; ++i)
3          matrix[i*n+j] += i*j;

```

Codi I.2: Operació sobre els elements d'una matriu recorrent-la per columnes

Tal i com s'ha guardat la matriu en memòria, per files, cada vegada que un element no es trobe a la memòria cau, aquest es descarregarà junt a elements de la mateixa fila o pròxims a aquesta. Per tant, al cas on es recorren els elements per files, les iteracions següents disposaran de les dades necessàries a la memòria cau. D'altra banda, quan es recorre per columnes, depenent del valor de n , en cada iteració successiva l'element es trobarà a una línia de memòria cau diferent, que s'haurà de descarregar de la memòria principal, ja que els elements d'una mateixa columna no estan contigus en memòria. Per a exemplificar-ho, la figura I.7 mostra aquest mateix exemple per a una matriu de dimensió 6×6 i amb una memòria cau amb una dimensió de línia corresponent a 4 elements de la matriu. La figura superior mostra els accessos necessaris per a fer el còmput accedint a la matriu per files, on s'empren tots els elements descarregats a la línia de memòria cau abans de descarregar la següent. A la inferior, en canvi, cada iteració necessita accedir a la memòria principal per tal d'obtenir la dada corresponent, la qual s'ha remarcat amb un requadre negre, ja que s'està accedint per columnes. Per fer-se una idea real d'aquest efecte, s'han executat els dos codis mostrats i s'han mesurat els temps de còmput per a un $n = 20000$. El còmput s'ha realitzat a un ordinador amb un processador Intel(R) Core(TM) i7-8550U CPU @ 1.80GHz, el qual compta amb una dimensió de memòria cau de 64 KB per nucli per a la L1, 256 KB per nucli per a la L2 i 4096 KB compartits a la L3. El temps de còmput total accedint per files és de 360 mili-segons, mentre que per columnes és de 6580 mili-segons.

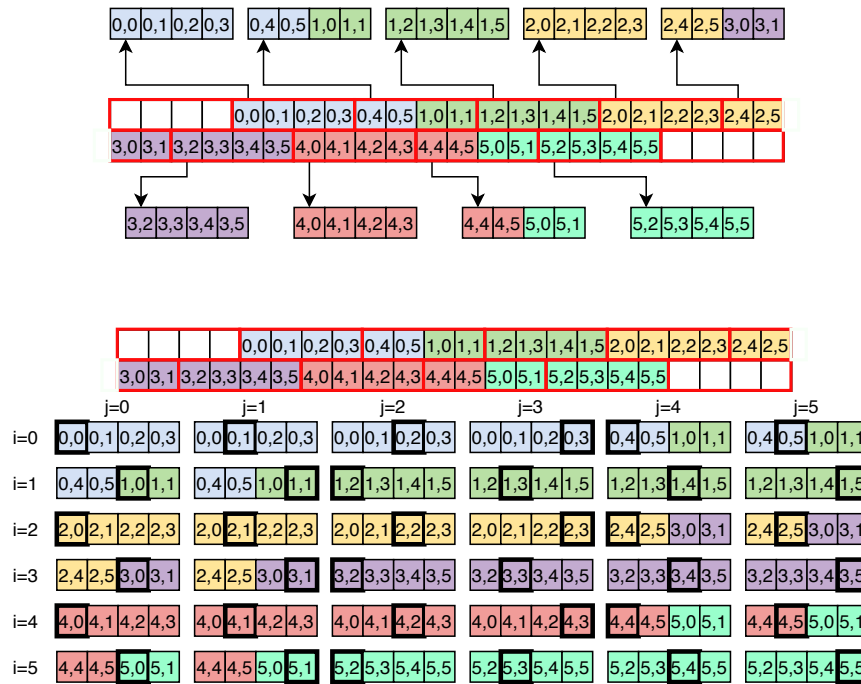


Figura I.7: Accessos a memòria requerits per a realitzar el còmput accedint a la matriu per files (dalt) i per columnes (baix). Els blocs amb contorn roig delimiten cada línia de memòria cau (4 elements) mentre que el color del requadre serveix per diferenciar la línia de la matriu. Els números a l'interior de cada requadre indiquen el parell (fila,columna) respectivament. A la figura inferior, l'element marcat amb el contorn negre indica l'únic element emprat en la línia de memòria cau abans ser substituïda a la següent iteració.

Per aplicar aquestes tècniques al cas de simulacions Monte Carlo, pot ser convenient reestructurar les dades del codi per tal d'agrupar-les en estructures que s'empren conjuntament a un mateix càlcul. Agrupar-les de forma contigua a memòria, permetrà reduir els accessos a la memòria principal, tal i com s'ha vist.

4.2 Paral·lelisme

Per tal de maximitzar l'ús tant de les arquitectures modernes de processadors basades en múltiples cors, com les infraestructures formades per un conjunt d'ordinadors o altres infraestructures distribuïdes (GRID, Cloud, etc) i maquinari específic (GPGPUs, FPGAs), es recorre a la computació paral·lela. Aquesta, consisteix en executar múltiples fils o processos de forma concurrent i que, en general, es comuniquen entre sí intercanviant informació per realitzar un còmput conjunt.

Al cas que ens ocupa però, el procés de dividir una simulació en peces

més menudes, que poden ser executades de forma independent per diferents fils o processos, és relativament senzill. Tenint en compte l'estructura d'un programa principal típic (secció 3.1.4), és fàcil arribar a la conclusió de que una simulació amb un nombre N_h d'històries a simular, es pot dividir en n simulacions independents, on s'executen N_h/n històries a cadascuna. L'únic que, a priori, cal tenir en compte, és que cada simulació genere una successió de nombres aleatoris independents per evitar correlacions amb els resultats. A més, s'han d'emprar comptadors independents per a cada fil o procés per tal de computar correctament el valor esperat de les magnituds a mesurar i les incerteses associades, tal i com s'ha vist a la secció 3.3. D'altra banda, els diferents fils o processos, en general, no requereixen comunicació entre ells fins al final de la simulació, on els resultats individuals de cada part es combinen.

El tipus de paral·lisme adient a emprar, dependrà de la infraestructura on s'execute el nostre codi. A continuació discutirem els diferents nivells de paral·lisme centrats en el nostre problema específic, les simulacions de Monte Carlo. Si parlem d'execucions en un conjunt de nodes independents que no comparteixen memòria principal, com a un *culster*, és clar que a cada node haurà d'executar-se un procés independent. No obstant, si considerem una única màquina, és a dir, estudiem el paral·lisme en memòria compartida, es pot emprar tant una aproximació multifils com una multiprocés, les quals presenten avantatges i inconvenients.

4.2.1 Multiprocés front a multifils en memòria compartida

Al llarg d'aquesta secció, per tal de diferenciar entre processos i fils, entendrem que un procés empra un espai de memòria aïllat. A més, suposem que no s'empren tècniques per a compartir informació entre processos mapejant regions comunes de la memòria principal al nostre codi, més enllà de les llibreries del sistema. Emprant aquest tipus de tècniques, s'obtidrien els desavantatges que trobem a l'aproximació de múltiples fils on es comparteix el mateix espai de memòria. Diferenciem, per tant, multiprocés com execucions concurrents amb espais de memòria independents, i multifils com un únic procés amb múltiples fils que comparteixen un espai de memòria comú. El motiu d'aquesta diferenciació, és que a treballs que trobem a la literatura [101, 102], s'ha emprat un paral·lisme basat en múltiples processos amb les característiques mencionades. D'aquesta forma es podrà determinar els avantatges i inconvenients d'aquest tipus de paral·lisme front a altres alternatives.

Amb aquesta suposició, l'aproximació multiprocés es basa en executar el programa complet n vegades a diferents processos amb N_h/n històries a simular a cada procés. Com que es tracta de processos independents, tot i que es pot establir comunicació entre ells emprant, per exemple, l'estàndard

MPI, cada procés disposa del seu espai de memòria aïllat, el que al seu torn ofereix avantatges i inconvenients. L'avantatge principal és la simplicitat. Donat que no hi ha diferents fils concurrents accedint al mateix espai de memòria, no s'ha de tenir cura d'efectes com les condicions de carrera o accessos atòmics que es discutiran més endavant. A més, donat el cas particular que s'està estudiant, la implementació d'aquest tipus de paral·lisme no requereix cap modificació en el codi original si s'implementa a partir de *scripts* [101], o involucra canvis mínims al programa principal si s'empra l'estàndard MPI [102]. Com a contrapartida, al mantenir una còpia de totes les dades requerides per a fer la simulació a cadascun dels processos, el consum de memòria serà, en general, molt major que a una aproximació multifil. A més, tenint en compte que gran part de les dades guardades a memòria són únicament de lectura, els processos no podran aprofitar aquest fet per compartir les línies de memòria cau, com veurem més endavant. Per tant, normalment, produirà més accessos a la memòria principal disminuint la velocitat de processament. Aquesta última característica la discutirem a continuació al cas de paral·lisme basat en múltiples fils. D'altra banda, cal remarcar que, tot i si es decideix emprar múltiples processos independents, depenent del codi del que es parteix, possiblement siga convenient reestructurar el codi igualment per tal d'optimitzar els accessos a memòria, tal i com s'ha vist a la secció 4.1. Si fora el cas, l'avantatge de la simplicitat d'implementació perd força, tot i que estalvia problemes com els que discutirem més endavant a la secció 4.2.2.

En l'aproximació multifils, tots els fils comparteixen el mateix espai de memòria, donat que es tracta d'un únic procés. Per tant, les dades guardades a la memòria cau per diferents fils fan referència al mateix espai de la memòria principal, permetent compartir-les i reduir el nombre d'accessos. Aquesta compartició de dades a nivell de memòria cau s'ha estudiat a la literatura [103], arribant a la conclusió que té una influència més que significativa sobre el temps total de còmput. No obstant, per tal d'explotar aquesta característica, és necessari estructurar el programa i el seu paral·lisme de forma adient. Algunes tècniques, aplicades a problemes concrets, per a optimitzar la compartició de dades en execucions paral·leles, mostren increments en la velocitat de processament majors d'un 19% per a problemes de grafs [104]. Altres estudis estudien el reagrupament de dades per millorar els accessos i mostren millores d'un 10% en l'eficiència [105]. A més, també influirà com s'organitzen els fils als diferents cors del processador, el que dependrà de l'arquitectura on s'executa. De fet, a la literatura podem trobar treballs centrats en el correcte mapejat dels fils als cors dels processadors [106, 107].

D'altra banda, compartir dades a nivell de memòria cau pot provocar problemes, ja que el processador ha d'assegurar que es manté la coherència a la memòria cau. Per aconseguir-ho, els processadors empen diferents

protocols. Per tal d'exemplificar aquest mecanisme i entendre els avantatges i dificultats del paral·lelisme amb múltiples fils, explicarem breument un d'aquests protocols, anomenat MESI [108], de les sigles en anglès *Modified Exclusive Shared Invalid*. L'elecció del protocol es deu a que és relativament simple, serveix de base per a protocols més complexos i empra un nombre menut d'estats possibles per a les línies de memòria cau, els quals es descriuen a continuació,

- **Invàlid:** Les dades no es troben a la memòria cau o la còpia local d'aquestes dades està desfasada degut a que ha sigut modificada a una altra CPU.
- **Compartit:** Dos o més CPUs tenen el mateix bloc de dades a la memòria cau, però totes les còpies estan actualitzades amb la memòria principal.
- **Exclusiu:** Una única memòria cau conté el valor correcte del bloc de dades i coincideix amb l'existent en la memòria principal.
- **Modificat:** Una única memòria cau conté el valor correcte del bloc de dades en tot el sistema. Per tant, les dades corresponents a la memòria principal estan desfasades.

Amb aquests estats, s'apliquen restriccions als estats que poden compartir les línies de memòria cau a dos memòries diferents. Aquestes es resumeixen a la taula I.2.

	M	E	C	I
M	×	×	×	✓
E	×	×	×	✓
C	×	×	✓	✓
I	✓	✓	✓	✓

Taula I.2: Estats compatibles entre línies de memòria cau per a qualsevol parell de memòries segons el protocol MESI.

En conseqüència, cada acció sobre la memòria cau per part de qualsevol dels cors del processador podrà afectar a l'estat de la resta. La forma en com afecta dependrà de si l'acció la realitza el propi cor o ve donada per un altre. Per exemple, considerem l'esquema de les figures I.8, I.9 i I.10. A aquest, s'ha considerat, per simplicitat, un processador amb dos cors, un únic nivell de memòria cau i una única línia. Amb aquesta configuració, es mostren les transicions des d'un estat inicial, mostrat a la part esquerra, fins a l'estat final de la part dreta després d'una certa operació. En primer lloc (Figura I.8), el sistema es troba a un estat on cap

de les dues memòries cau conté informació i, per tant, les línies es troben en estat *invàlid*. Aleshores, s'executa una operació de lectura per part del cor 1, descarregant de la memòria principal la línia corresponent i assignant-li l'estat *exclusiu*, donat que cap altra memòria la conté. A la següent seqüència (Figura I.9), partint de l'estat final anterior, el cor 2 executa una lectura de la mateixa línia. Com que aquesta es troba en estat exclusiu al cor 1, serà transferida a la memòria cau del cor 2 i l'estat d'ambdues memòries passarà a ser *compartit*. En aquest punt, ambdós cors podran llegir aquesta línia de dades directament de la seua memòria cau, donat que els valors d'ambdues són coherents. Finalment, l'última transició (Figura I.10) parteix de l'estat final anterior i s'executa una instrucció d'escriptura sobre la línia de memòria cau al cor 2. En conseqüència, l'estat al cor 2 passa a ser *modificat* i el del cor 1 a *invàlid*, ja que aquest últim conté una versió desfasada de les dades. Si posteriorment el cor 1 vol tornar a llegir aquesta línia de dades, el cor 2 haurà d'enviar l'ordre corresponent per actualitzar el seu valor a la memòria principal i ambdós tornaran a l'estat *compartit*.

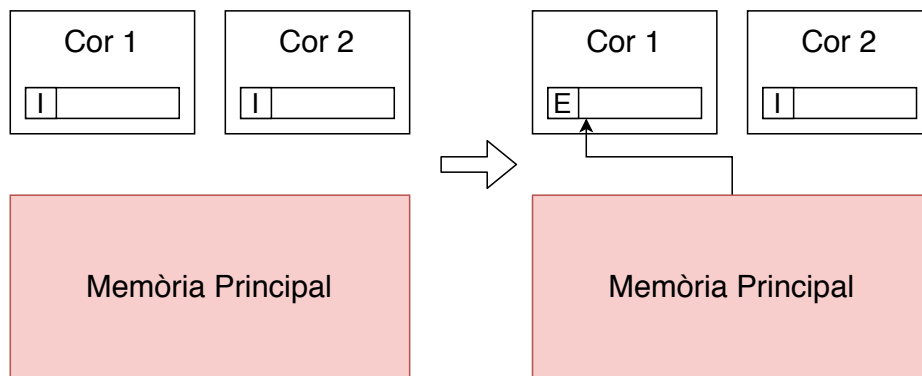


Figura I.8: Canvis d'un estat inicial (esquerra) a l'estat final (dreta), després d'una lectura que dades no existents a la memòria cau.

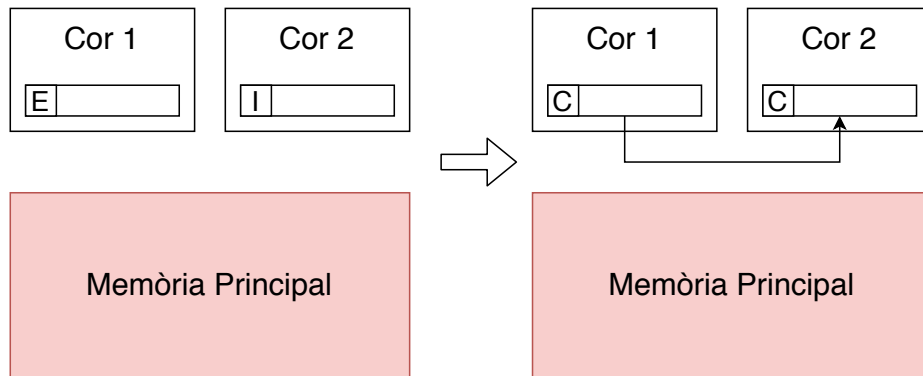


Figura I.9: Canvis d'un estat inicial (esquerra) a l'estat final (dreta), després d'una lectura de dades existents a una memòria cau.

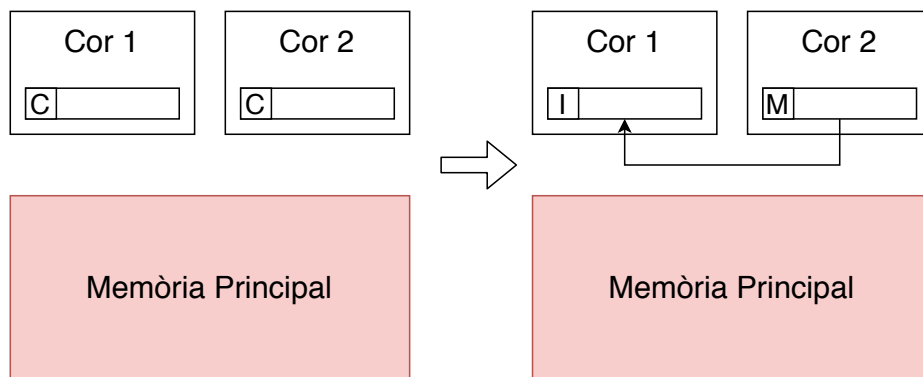


Figura I.10: Canvis d'un estat inicial (esquerra) a l'estat final (dreta), després d'una escriptura a una línia existent a ambdós memòries en estat compartit.

Mirant en primer lloc els avantatges, a l'exemple anterior s'ha mostrat que compartir espais de memòria entre fils permet que es puguin aprofitar dades ja existents a la memòria cau sense haver de descarregar-les múltiples vegades de la memòria principal, accelerant així el temps de còmput. Per demostrar-ho, s'ha realitzat un experiment simple amb un codi que executa el producte d'una matriu de dimensió $n \times n$ per 1000 vectors de dimensió n . L'algorisme elegit, per simplicitat, té una complexitat d'ordre $O(n^2)$ i es mostra al codi I.3. El mateix codi s'ha paral·lelitzat, d'una banda emprant una aproximació multifils, la qual aprofitarà la compartició de dades a la memòria cau, i d'altra emprant múltiples processos MPI, forçant així que cada procés dispose de la seua regió de memòria aïllada i no es compartiquen dades a la memòria cau entre processos. Donat que es pretén

demostrar els avantatges de la compartició de dades entre fils a un mateix ordinador, es podrien haver emprat múltiples processos independents en compte de l'estàndard MPI. No obstant, emprar l'estàndard MPI ens permet sincronitzar els processos de forma senzilla per tal de realitzar les mesures del temps de processament de forma correcta. La implementació d'ambdós aproximacions, respectivament, es pot trobar als codis A.1 i A.2 de l'apèndix A. A ambdós casos, les dades a processar són exactament les mateixes. Per a aconseguir-ho, en ambdós mètodes s'han dividit el nombre de vectors a multiplicar entre el nombre de fils o processos disponibles. Per analogia a les simulacions de Monte Carlo, únicament s'ha comptabilitzat el temps d'execució, negligint les comunicacions per reunir els resultats. El test s'ha executat a un ordinador amb processador Intel(R) Core(TM) i7-8550U CPU @ 1.80GHz i 12 GB de memòria principal, la memòria cau del qual és de 64 KB per nucli per a la L1, 256 KB per nucli per a la L2 i 4096 KB compartits a la L3. El processador en qüestió disposa de 4 cors físics i 8 fils lògics, pel que les proves s'han executat amb 4 i 8 fils o processos. A més, s'han ajustat les afinitats als cors del processador per a minimitzar els canvis de context entre fils o processos.

```

1
2 void prod(double* result ,
3         const double* vector ,
4         const double* matrix ,
5         const unsigned long n){
6
7     for(unsigned long i = 0; i < n; ++i){
8         double sum = 0.0;
9         for(unsigned long j = 0; j < n; ++j)
10            sum += vector[j]*matrix[i*n+j];
11        result[i] = sum;
12    }
13
14 }
```

Codi I.3: Funció del producte matriu vector

A la figura I.11 estan representats els resultats de l'experiment descrit. Es comprova clarament com el paral·lelisme amb múltiples fils trau avantatge de la compartició de memòria, especialment quan s'empren 8 fils o processos, on dos d'aquests han de compartir el mateix cor i els seus recursos i, per tant, els nivells L1 i L2 a més del L3 de la memòria cau. Aquest resultat es pot veure a la figura I.12, on la gràfica esquerra mostra el quocient dels temps de còmput entre les versions MPI i multifils, mentre que a la gràfica dreta es representa el quocient del temps de còmput d'una mateixa versió, MPI o multifil, emprant 4 i 8 processos o fils respectivament.

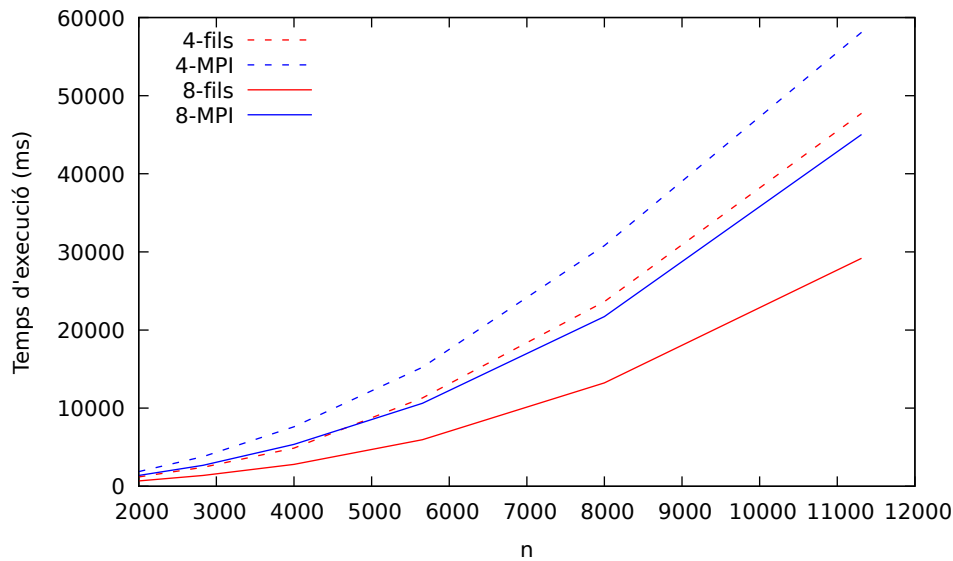


Figura I.11: Temps d'execució per a diferents dimensions del producte matriu vector paral·lelitzat amb múltiples fils i processos MPI. Les línies puntejades corresponen al cas de 4 fils/processos i les contínues al cas on s'han emprat 8.

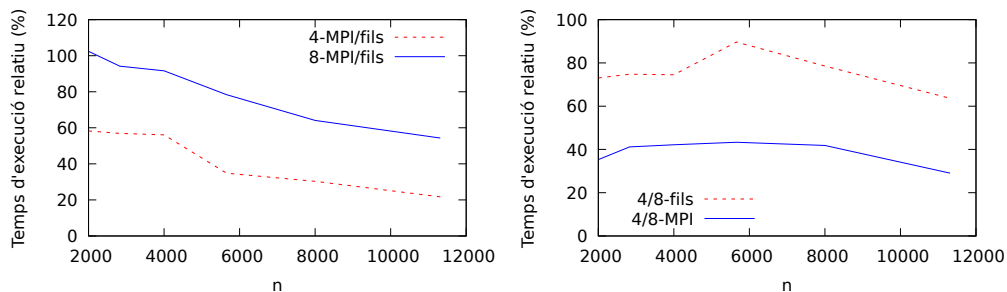


Figura I.12: Temps relatius de càlcul de la figura I.11. La figura esquerra mostra el quocient entre l'execució MPI i multifils emprant 4 (roig o puntejat) i 8 (blau o continu) processos i fils. En canvi, la figura dreta mostra el quocient del temps de càlcul de les execucions multifils amb 4 i 8 fils (roig o puntejat) i de les execucions MPI amb 4 i 8 processos (blau o continu).

Cal remarcar que aquests resultats s'han obtingut per a un problema on la disposició de les dades i el tipus de càlcul es beneficia molt d'aquest tipus d'optimització. En les simulacions de Monte Carlo però, on l'execució de cada fil o procés segueix diferents camins degut a la natura estadística del problema, no s'espera aconseguir millores tan altes respecte al paral·lelisme multiprocés. Per tal de maximitzar les dades comunes emprades a

diferents fils, es pot recórrer a reestructurar el codi per tal d'agrupar execucions similars. Per exemple, al nostre cas, es pot assignar a cada grup de fils un tipus específic de partícula a simular o, inclús, d'interacció, acotant així les dades que s'empraran per aquests. De fet, és el que actualment s'està estudiant per a optimitzar més el codi desenvolupat a l'últim treball del present document. Tot i que no es discutirà, perquè aquesta part continua en desenvolupament, la reestructuració mencionada, a més, serà molt útil per aconseguir un paral·lisme eficient en GPGPUs, ja que evita ramificacions en les execucions dels diferents fils.

4.2.2 Dificultats del paral·lisme en memòria compartida

Passem ara a discutir les dificultats del paral·lisme quan es comparteix l'espai de memòria. Seguint amb els accessos a la memòria cau, un dels problemes d'emprar múltiples fils que accedeixen a les mateixes dades és l'efecte conegut com *false sharing* [109]. Aquest es veu exemplificat en l'última transició, corresponent a la figura I.10. Imaginem que tenim dues dades contigües a memòria (a i b) i localitzades a la mateixa línia de memòria cau. A més, dos fils independents que s'executen sobre diferents cors operen sobre elles de forma iterativa, on el primer únicament llegeix la variable a i la suma a un comptador, i el segon incrementa el valor de b en cada iteració. En aquesta configuració, tot i que el primer fil únicament llegeix sense modificar la línia de memòria cau, l'escriptura del segon invalida la línia guardada pel primer fil, tal i com s'ha mostrat a l'última transició de la figura I.10. Per tant, el primer cor ha d'actualitzar contínuament la línia de memòria cau, perjudicant a la velocitat de còmput. Si pel contrari a i b es trobaren a blocs de memòria diferents, el primer fil podria accedir a a sense sofrir cap interferència causada pel segon fil. Com a conseqüència, a un cas extrem, el *false sharing* pot arribar a causar que una versió paral·lelitzada d'un mateix programa siga més lenta que l'equivalent seqüencial. Per aquest motiu, actualment es continua treballant en sistemes per a detectar i corregir aquest efecte [110, 111, 112].

Fins aquest punt, s'ha vist la importància de planificar l'estructura i agrupació de les dades als programes per tal de minimitzar els accessos a memòria i millorar així significativament els temps de còmput. No obstant, existeixen altres efectes que afecten directament a la correcta execució d'un programa, provocant que els resultats siguin erronis. El primer que es discutirà són les *Condicions de Carrera*. Una condició de carrera es dona quan dos o més fils accedeixen de forma concurrent a una mateixa dada i un d'ells la modifica. Com que no es pot predir l'ordre en que els fils accediran i modificaran les dades, en cada execució els diferents fils obtindran, en general, lectures distintes al mateix punt del programa emprant les mateixes dades d'entrada. També pot ocasionar una falta de coherència

en les lectures, arribant a modificar el camí a seguir dels fils concurrents. Prenem com a exemple el codi I.4, on es mostra una funció que serà executada per diferents fils de forma concurrent. El primer que l'execute, en teoria, modificarà el valor de x evitant que la resta de fils executen el codi a l'interior de la sentència *if*.

```
1
2 void fil(int* x, const unsigned nfil){
3
4     if(*x < 1){
5         printf("El fil %d ha entrat primer\n", nfil);
6         *x = 1;
7     }
8 }
```

Codi I.4: Exemple de condició de carrera

Si més no, al córrer el codi I.4 amb 10 fils concurrents, la sortida del programa mostra el següent missatge,

```
El fil 0 ha entrat primer
El fil 1 ha entrat primer
El fil 2 ha entrat primer
El fil 3 ha entrat primer
```

ja que els fils 1,2 i 3 han accedit a l'interior de l'*if* abans que el canvi del fil 0 sobre la variable x es fera efectiu. A un programa complex, aquest tipus d'errors són sovint difícils de detectar i poden provocar que, en major o menor freqüència, l'execució del programa falle o siga errònia. Més encara, els accessos concurrents d'aquest tipus tindran un comportament indefinit segons l'estàndard de C++, pel que no es pot predir com afectarà al nostre codi. Per evitar aquest comportament no desitjat, al cas mostrat, s'emprarà un semàfor. Al codi I.5 s'ha modificat l'exemple anterior per tal d'assegurar que els fils accedeixen de forma ordenada a la sentència *if*. Per aconseguir-ho, s'empra la variable *clau* del tipus *mutex*, la qual serveix per a bloquejar els fils per tal d'evitar accessos simultanis a dades compartides. Quan un fil arriba a la línia *lock_guard*, aquest comprovarà si algun altre fil ha "bloquejat" la "clau". Si no ha sigut bloquejada per cap altre fil, aquest la bloquejarà i continuarà la seua execució. Si està bloquejada, esperarà fins que el fil que l'haja bloquejat l'allibere, que en el codi mostrat ocorre quan el fil ix de la funció *fil*, i intentarà reclamar-la per continuar la seua execució.

```

1
2 std::mutex clau;
3
4 void fil(int* x, const unsigned nfil){
5
6     //Bloqueja el fil fins que la clau quede lliure
7     std::lock_guard<std::mutex> bloqueja(clau);
8
9     if(*x < 1){
10        printf("El fil %d ha entrat primer\n", nfil);
11        *x = 1;
12    }
13 }

```

Codi I.5: Correcció de la condició de carrera

Tant a C++ com a altres llenguatges existeixen altres tipus d'instruccions o variables de sincronització per evitar accessos concurrents. No obstant, la funcionalitat de totes elles es basa en bloquejar l'execució dels diferents fils. En conseqüència, durant el bloqueig, els fils corresponents queden a l'espera de poder avançar, el que pot endarrerir significativament l'execució del codi. Més encara, pot donar-se l'esdeveniment conegut com *deadlock* o interbloqueig, en el qual el programa queda bloquejat evitant que pugui continuar. Una causa dels interbloquejos es dona quan dos fils necessiten accedir a dues variables protegides. Per exemple, si el fil α bloqueja la variable a al mateix temps que el fil β bloqueja la variable b i, tot seguit, α intenta bloquejar b i β intenta bloquejar a sense que s'haja alliberat cap dels dos, l'execució caurà en un interbloqueig i cap dels dos fils podrà continuar.

El cas dels interbloquejos no és exclusiu de les execucions multifil. Quan s'empren múltiples processos que requereixen comunicació, es pot donar un interbloqueig si dos processos esperen rebre simultàniament un missatge l'un de l'altre, ja que l'execució d'ambdós queda parada fins a rebre el missatge.

Per tant, per a maximitzar l'eficiència d'un programa paral·lel, s'ha de tindre especial cura amb els accessos concurrents a les dades i, a més, és convenient estructurar el codi per tal de minimitzar els punts de sincronització, els quals seqüencialitzen l'execució del programa.

4.3 Polimorfisme en llenguatges orientats a objectes

Per a finalitzar, parlarem de com aconseguir un compromís entre flexibilitat i eficiència. En aquesta secció les tècniques emprades es centren en el llenguatge C++, tot i que poden ser útils per a altres llenguatges Orientats a Objectes (OO). Aquest tipus de llenguatges permeten emprar polimorfismes entre els objectes definits, aconseguint que diferent tipus d'objectes

compartisquen una interfície comuna alhora que cada un conté una estructura i funcionalitat diferents. Esta característica proporciona compatibilitat entre instàncies de diferents tipus d'objectes amb una interfície comuna, al mateix temps que s'evita duplicitat en el codi.

El polimorfisme és especialment útil a l'hora de crear un codi que siga fàcilment extensible, tant per part dels desenvolupadors, com per part de tercers, com usuaris amb necessitats específiques. Considerem per exemple, al cas que ens ocupa, les geometries on es transporten les partícules en les simulacions de Monte Carlo. En aquesta, suposem que es proveeix tant una interfície comuna com un tipus de geometria exemple basat en quàdriques, tal i com es mostra al codi I.6.

```

1
2 class Geometria{
3
4     protected:
5         unsigned nombre_elements;
6     public:
7         Geometria();
8         unsigned nElements();
9         virtual void mou(double* pos, double* dir) = 0;
10        virtual bool esMallat(){return false;}
11 };
12
13 class Quadrica: public Geometria{
14     private:
15         double volum;
16     public:
17         Quadrica();
18         void mou(double* pos, double* dir);
19 };
20
21 void MouParticula(Geometria* geo, double* pos, double* dir){
22     geo->mou(pos, dir);
23 }

```

Codi I.6: Exemple de polimorfisme

Aquest és un exemple simplificat i no la implementació real. La primera classe (*Geometria*) defineix la interfície comuna que compartiran tots els objectes derivats del tipus *Geometria*, assegurant així que siguem compatibles. Com a conseqüència, tant els objectes de tipus *Quadrica* com qualsevol nou tipus derivat de *Geometria* contindran les variables i mètodes presents a aquesta última. Vegem a la definició del tipus *Geometria* que el mètode *mou* és un mètode virtual pur, ja que s'ha especificat afegint `= 0` al final de la signatura. Significa, per tant, que no es proveeix una implementació base per aquest mètode i que aquesta classe no es podrà instanciar, únicament es podran instanciar classes derivades, com *Quadrica*.

A més, aquestes, necessàriament hauran d'implementar el mètode virtual pur *mou*. D'altra banda, el mètode virtual *esMallat*, al no ser virtual pur, s'implementarà al tipus base *Geometria*. No obstant, al ser virtual podrà ser substituït de forma opcional a les classes derivades, sobreescrivint l'ús de la implementació de la classe base. A més, cal remarcar que de qualsevol instància derivada de la classe base *Geometria* podrà extraure's un punter a aquesta, pel que la funció *MouPartícula* podrà prendre com argument un objecte del tipus *Quadrica* i executar el seu mètode *mou*.

Tota aquesta discussió no sembla útil al nostre cas, ja que únicament hem considerat una classe derivada, la *Quadrica*. Suposem ara que s'implementa un nou tipus de geometria, anomenat *Malla*, tal i com mostra el codi I.7.

```

1
2 class Malla: public Geometria{
3     private:
4         double volumElement;
5     public:
6         Malla();
7         void mou(double* pos, double* dir);
8         bool esMallat() {return true;}
9         void redimensiona(unsigned dim);
10 };

```

Codi I.7: Classe derivada Malla

Ara, la funció *MouPartícula* podrà funcionar tant en instàncies d'objectes de tipus *Quadrica* com de tipus *Malla*, sense necessitat de realitzar més canvis al codi. Açò és possible perquè la interfície *Geometria* assegura que ambdues contenen una implementació del mètode *mou*. No obstant, apareix un problema. Quan es produeix la transformació d'una classe derivada a la classe base, les variables i mètodes específics de la classe derivada no són visibles a través del punter o referència a la classe base. A més, en temps de compilació, el tipus derivat de l'objecte passat a la funció *MouPartícula* és desconegut, ja que pot ser tant una instància de la classe *Quadrica* com de la *Malla*. Per tant, no es coneix a priori quina implementació del mètode *mou* s'ha d'executar, si el d'una classe o el de l'altra. El mecanisme que s'empra a C++ per resoldre aquest conflicte són les anomenades Taules Virtuals de Funcions (TVF) (conegudes típicament com *vtable*). Tot i que la implementació depèn del compilador, la idea bàsica és que quan una classe defineix mètodes virtuals, el compilador afig un punter a l'estat de la classe, el qual guarda la direcció d'un vector de punters de mètodes virtuals de la classe derivada corresponent, que són les TVF. Mentre que per a un mètode no virtual la instància emprarà directament el punter al mètode corresponent, per als virtuals s'accedeix a través de les adreces guardades en la TVF, que dependrà del tipus d'objecte instanciat.

Aquest mecanisme està representat a la figura I.13, on la instància de tipus *Malla* conté tant l'estat definit a la classe derivada *Malla* com a la base *Geometria* i, en aquesta, s'afeg el punter on es guardarà la direcció de memòria on es troba la taula amb les direccions dels mètodes virtuals corresponents a la classe *Malla*. Tot i que no es tractarà al present document, aquesta discussió es pot estendre per a diferents nivells de polimorfisme, on de les classes derivades *Quadrica* i *Malla*, al seu torn, es derivaren noves classes o s'empren múltiples classes base.

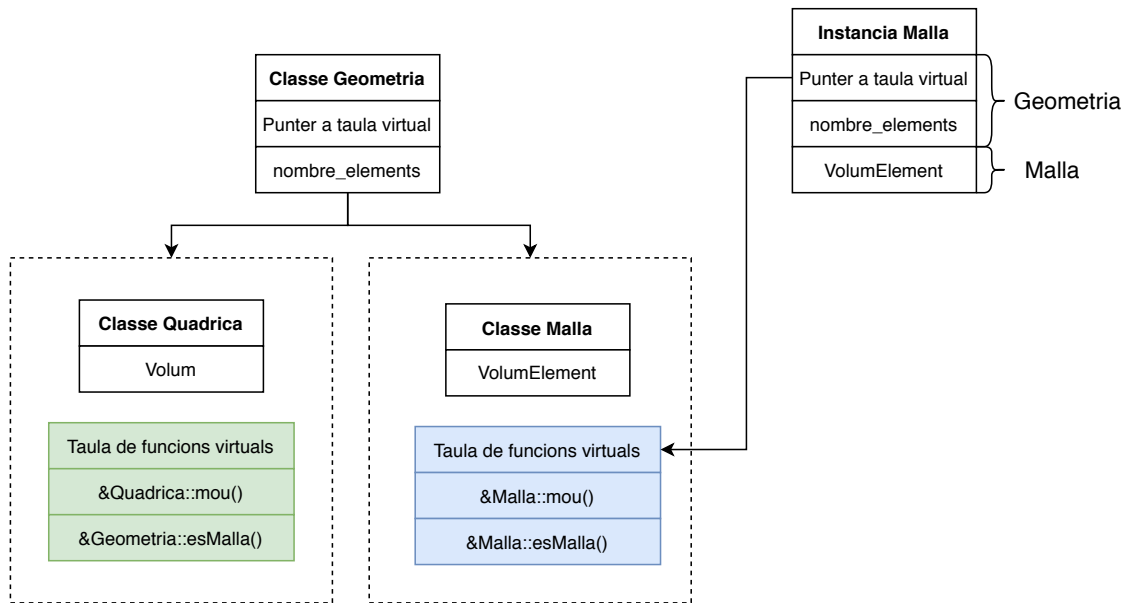


Figura I.13: Mecanisme de les taules de funcions virtuals

Com és de suposar, el redireccionament d'aquest mecanisme ocasiona un sobrecoast a l'hora d'invocar mètodes virtuals. Més encara, si el compilador no coneix el tipus d'objecte derivat en temps de compilació, com és el cas de la funció *MouParticula*, no es podran aplicar certes optimitzacions, com el *inlining*. Aquests dos tipus de sobrecoast es cataloguen com directe i indirecte [113], i, depenent del cas particular del programa, produeix un increment significatiu en el temps total de còmput. Més encara, en codis on s'instancien un gran nombre d'objectes relativament menuts, l'ús d'un punter extra pot ocasionar un consum de memòria excessiu [114]. No obstant, depenent del compilador, si es coneix el tipus d'objecte quan s'invoca un mètode virtual, l'efecte sobre el temps de còmput podrà evitar-se, ja que sabrà quin mètode invocar durant la compilació.

Continuant amb els problemes, si en algun cas es necessitara emprar una variable o mètode del tipus derivat de l'objecte a una funció on es pren un punter o referència de la classe base, com a *MouParticula*, serà necessari convertir el punter o referència de la classe base al de la classe derivada,

el que es coneix com *downcasting*. Aquesta operació és computacionalment costosa, ja que s'ha de comprovar en temps d'execució si, a l'exemple mostrat, el punter d'entrada *Geometria* correspon a una instància de tipus *Quadrica* o de tipus *Malla*. Tot i que es pot realitzar aquesta transformació durant la compilació, pot provocar errors difícils de detectar si no s'està segur del tipus derivat. Com a exemple, al codi I.8 s'ha modificat la funció *MouParticula* per a que es determine si l'argument *geo* és de tipus *Quadrica* o *Malla*. En primer lloc, s'ha intentat una conversió dinàmica amb la instrucció *dynamic_cast* per a determinar si és una *Quadrica*. Este, farà la comprovació en temps d'execució. D'altra banda, com que únicament tenim dos tipus disponibles, si no es tracta d'un objecte de tipus *Quadrica* es pot fer la conversió estàtica de forma segura amb un *static_cast*, donat que hem descartat la resta de possibilitats.

```

1
2 void MouParticula(Geometria* geo, double* pos, double* dir){
3     geo->mou(pos, dir);
4
5     Quadrica* pQuad;
6     if(pQuad = dynamic_cast<Quadrica*>(geo)){
7         //Geometria de tipus "Quadrica"
8     }
9     else{
10        //Geometria de tipus "Malla"
11        Malla* pMalla = static_cast<Malla*>(geo);
12    }
13 }
```

Codi I.8: Inferència dinàmica i estàtica de la classe derivada

Els efectes discutits no sols afecten a la programació en CPUs, sinó també si s'empra aquest tipus de polimorfisme en GPUs [115], pel que implementar una bona estructura base servirà per a optimitzar el paral·lisme en aquest tipus de maquinari específic.

Per tal d'obtindre informació sobre el tipus d'objecte derivat i evitar, quan siga possible, els inconvenients anteriors, es pot recórrer a les plantilles. Aquestes, permeten deixar un o més tipus de variables lliures en les definicions tant de funcions com de classes. Durant la compilació, el compilador crearà el codi necessari per a cada tipus que s'empren al programa. Per exemple, al codi I.9 s'ha creat una funció plantilla que suma dues variables. El tipus d'aquestes variables (*T*) s'especifica com argument de la plantilla, pel que no està definit d'entrada. D'altra banda, a la funció *main* s'executa aquesta funció amb els tipus de variable *float* i *int*. Per tant, el compilador crearà la funció *float suma(float a, float b)* i *int suma(int a, int b)* durant la compilació.

```

1
2 template<class T>
3 T suma(T a, T b){
4     return a+b;
5 }
6
7 int main(){
8
9     float af = 23.5;
10    float bf = 12.6;
11
12    int ad = 8;
13    int bd = 30;
14
15    printf( "%E\n", suma(af, bf) );
16    printf( "%d\n", suma(ad, bd) );
17    return 0;
18 }
19
20 }

```

Codi I.9: Exemple bàsic de plantilles

Emprant plantilles per a modificar la funció *MouParticula* es pot obtenir el codi I.10, on es poden evitar les cridades virtuals, ja que s'invocuen directament des de l'última classe derivada. A més, es pot comprovar el tipus gràcies a directrius com *is_same* i evitar transformar el tipus de l'objecte amb un *downcasting*. Cal remarcar que la directriu *is_same*, en compiladors moderns, s'avalua durant la compilació. Per exemple, si *TipusGeo* és *Quadrica*, la instrucció serà equivalent a escriure *if(true)*, el que no produirà cap sobrecost si s'activen les optimitzacions del compilador.

```

1
2 template <class TipusGeo>
3 void MouParticula(TipusGeo* geo, double* pos, double* dir){
4     geo->mou(pos, dir);
5
6     if(std::is_same<TipusGeo, Quadrica>::value){
7         //Geometria de tipus "Quadrica"
8     }
9     else{
10        //Geometria de tipus "Malla"
11    }

```

Codi I.10: Funció *MouParticula* amb plantilles

No obstant, al codi anterior, el compilador podrà crear una versió de la funció per a qualsevol classe que implemente un mètode *mou* amb la mateixa signatura, siga o no una classe derivada de *Geometria*. Per a restringir les classes vàlides a la plantilla, es pot emprar la instrucció *enable_if* junt a *is_convertible* per a habilitar la plantilla únicament per a classes que es

puguen convertir a la classe base *Geometria*. Amb tècniques similars es poden optimitzar les herències i compatibilitats entre classes.

Malauradament existeixen limitacions que no permeten emprar aquest tipus de tècnica de forma general. Per exemple, per emmagatzemar diferents objectes derivats d'una mateixa classe base a un vector. A més, l'ús de plantilles suposa diferents desavantatges, com dificultar tant la implementació com la depuració, ja que les tècniques són més complexes. Més encara, donat que el compilador únicament crearà el codi per a aquelles classes que empren la plantilla, ja siga en la definició d'una classe o funció, una llibreria podria contenir errors quan es crea codi per a classes no provades durant el desenvolupament. Per tant, complica en gran mesura la fase de proves i depuració, ja que poden amagar-se comportaments o errors de compilació en situacions específiques que no s'han considerat. També s'ha de tenir en compte i filtrar el tipus de classes i variables que acceptarà la plantilla, emprant instruccions com les mencionades anteriorment (*enable_if*, *is_convertible*, etc).

En conclusió, donats els avantatges i inconvenients de cada tècnica, s'haurà d'arribar a un compromís entre la flexibilitat i simplicitat aportada pels mètodes virtuals i l'eficiència i limitacions de les plantilles per aconseguir que el nostre programa siga modular, fàcil de mantindre, extensible i eficient.

Capítol II

Recerca científica

1 Collision-kerma conversion between dose-to-tissue and dose-to-water by photon energy-fluence corrections in low-energy brachytherapy

1.1 Introducció i motivació

L'estudi de la conversió entre dosi en teixit (D_t) i dosi en aigua (D_a) és necessari per tal de poder relacionar els estudis i experiència clínica basats en dosi en aigua amb les noves metodologies basades en dosi en teixit. Algunes publicacions centrades en aquesta temàtica són [11, 116, 117, 118].

Típicament, en braquiteràpia amb fonts de baixa energia, el càlcul de la dosi absorbida es realitza emprant la teoria de cavitats grans, assumint que la cavitat és major que el rang dels electrons secundaris i que la fluència energètica dels fotons en el punt d'interès és pràcticament igual per a l'aigua i els diferents teixits del cos humà. Amb aquestes suposicions, la conversió entre dosi dipositada en teixit i dosi dipositada en aigua es pot obtenir a partir dels quocients dels coeficients d'absorció màssics (equació I.5).

D'altra banda, el mecanisme estàndard emprat per a obtenir la distribució de dosi dipositada a un medi, per una font radioactiva, ve descrit pel formalisme del TG-43 (secció 2.1). A partir d'aquest, es tabulen les distribucions de dosi en aigua que després són transformades a dosi en teixit amb el mecanisme ja descrit. No obstant, la suposició de que la fluència energètica roman constant al canviar a teixit no és necessàriament certa, sobretot a baixes energies i en materials amb un Z elevat en comparació amb l'aigua, com es veurà al present treball. Aquestes condicions es troben en tractaments de braquiteràpia típics, el que fa palès en la necessitat de determinar la influència de les variacions de les fluències energètiques en la

conversió de dosi en aigua a dosi en teixit. Una vegada conegut l'efecte, caldrà, a més, determinar els factors necessaris per corregir dites discrepàncies en diferents teixits humans d'interès en tractaments de braquiteràpia.

1.2 Objectius de l'estudi

L'objectiu del treball presentat és estudiar la influència de les variacions de les fluències energètiques de fotons en diferents teixits humans d'interès en tractaments de braquiteràpia. A partir d'aquest estudi, es proposen una sèrie de factors correctors per a compensar les desviacions de fluència energètica en les conversions entre dosi en aigua i dosi en els teixits estudiats.

L'estudi es realitza per a tres llavors de baixa energia típicament emprades en braquiteràpia (^{103}Pd , ^{125}I i ^{131}Cs).

1.3 Materials i mètodes

Per tal de realitzar els càlculs necessaris per aquest estudi, s'ha emprat la versió 2014 del codi de Monte Carlo PENELOPE (secció 3.1) a través del programa PenEasy (secció 3.5).

Les llavors emprades en l'estudi corresponen als models,

- Model IAPd-103A ^{103}Pd source (IsoAid LLC, Port Richey, FL, USA)
- Model 6711 ^{125}I source (GE Healthcare, IL. Marketed by Oncura, Inc)
- Model Cs-1 Rev2 ^{131}Cs source (IsoRay Medical, Richland, WA).

la geometria de les quals s'ha construït a partir de les descripcions publicades a [119], [120] i [14]. D'altra banda, els espectres dels radionúclids s'han obtingut del *USA National Nuclear Data Center* (NNDC), amb una energia mitjana de l'espectre de fotons de 20.8 keV, 28.5 keV i 30.4 keV respectivament [121].

El model de geometria emprat a aquest treball es mostra a la figura II.1. Aquest, consisteix en una esfera "infinita"¹ d'aigua (R=30 cm), que conté un detector consistent en una closca esfèrica concèntrica amb un gruix de $\Delta r = 0.2$ cm, i la llavor a estudiar en el centre geomètric de l'esfera. El gruix del detector s'ha elegit, aproximadament, d'acord amb l'abast dels electrons amb màxima energia de l'espectre de la font de ^{103}Pd ($R_{\text{CSDA},497\text{keV}} = 0.18\text{cm}$). A més, s'estudien dues posicions per al detector.

¹Es considera infinita ja que el recorregut lliure mitjà d'un fotó de 25 keV, en aigua, és de l'ordre de 2.2 cm. Per tant, 30 cm corresponen a quasi 14 recorreguts lliures mitjans, sent menyspreable el nombre de fotons que arribaran a dita distància.

En la primera, el detector es situa a $r = 1$ cm del centre, d'acord amb la distància típica de prescripció emprada en la clínica. En segon lloc, es situa el detector a $r = 5$ cm, que correspon a la distància típica dels òrgans en risc.

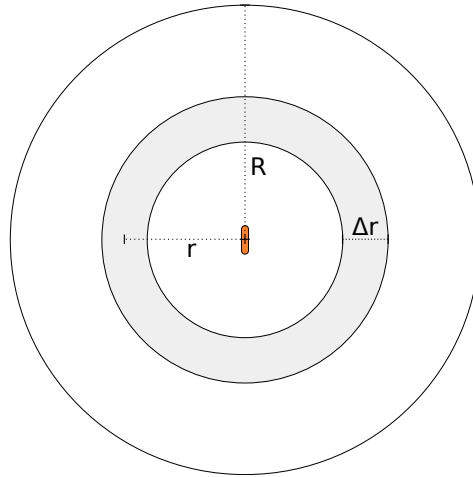


Figura II.1: Esquema de la geometria emprada. La dimensió del fantoma d'aigua correspon a una esfera amb $R = 30$ cm, el gruix del detector $\Delta r = 0.2$ cm i per a la distància entre el centre de la font i el centre del detector (r) s'ha emprat 1 i 5 cm.

A aquests detectors es mesurarà tant la dosi absorbida com l'espectre energètic de fluència energètica dels fotons incidents. A més, per al material del detector, s'emprarà, a part de l'aigua, una sèrie de teixits d'interès a braquiteràpia per tal d'estudiar la variació de la fluència i els seus efectes en la conversió de dosi. Aquests teixits són, múscul, teixit adipós, i dos tipus d'os, cortical i esquelètic, les composicions dels quals venen descrites a [122] i [123] respectivament. Les composicions i altres propietats rellevants es troben recopilades a la taula II.1.

Material	Aigua	Múscul	Teixit adipós	Os cortical	Os esquelètic
H	$1.12 \cdot 10^{-1}$	$1.01 \cdot 10^{-1}$	$1.19 \cdot 10^{-1}$	$4.72 \cdot 10^{-2}$	$6.39 \cdot 10^{-2}$
C	-	$1.08 \cdot 10^{-1}$	$6.37 \cdot 10^{-1}$	$1.44 \cdot 10^{-1}$	$2.78 \cdot 10^{-1}$
N	-	$2.77 \cdot 10^{-2}$	$7.97 \cdot 10^{-3}$	$4.19 \cdot 10^{-2}$	$2.70 \cdot 10^{-2}$
O	$8.80 \cdot 10^{-1}$	$7.55 \cdot 10^{-1}$	$2.32 \cdot 10^{-1}$	$4.46 \cdot 10^{-1}$	$4.10 \cdot 10^{-1}$
Mg	-	$1.90 \cdot 10^{-4}$	$2.00 \cdot 10^{-5}$	$2.20 \cdot 10^{-3}$	$2.00 \cdot 10^{-3}$
P	-	$1.80 \cdot 10^{-3}$	$1.60 \cdot 10^{-4}$	$1.05 \cdot 10^{-1}$	$7.00 \cdot 10^{-2}$
S	-	$2.41 \cdot 10^{-3}$	$7.30 \cdot 10^{-4}$	$3.15 \cdot 10^{-3}$	$2.00 \cdot 10^{-3}$
Cl	-	$7.90 \cdot 10^{-4}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	-	-
K	-	$3.02 \cdot 10^{-3}$	$3.20 \cdot 10^{-4}$	-	-
Ca	-	$3.00 \cdot 10^{-5}$	$2.00 \cdot 10^{-5}$	$2.09 \cdot 10^{-1}$	$1.47 \cdot 10^{-1}$
Altres	-	$6.00 \cdot 10^{-5}$	$5.00 \cdot 10^{-4}$	$4.55 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-4}$
$\rho Z/A$	0.5540	0.5714	0.5138	0.9644	0.9807
ρ (gcm^{-3})	0.998	1.04	0.92	1.85	1.85
I(eV)	78	75.3	63.2	106.4	91.9

Taula II.1: Composicions dels materials, en fracció en pes, i propietats atòmiques rellevants.

Amb aquestes mesures, el procediment a seguir consisteix en comparar la dosi dipositada en aigua, calculada directament a partir de la simulació Monte Carlo, amb la calculada a partir de la transformació de la dosi dipositada en teixit. Al seu torn, la conversió es calcularà amb dues aproximacions, primer suposant que les fluències energètiques de fotons romanen constants en aigua i en els diferents teixits (equació II.1) i, en segon lloc, corregint la variació de les fluències (equació II.2).

$$D_a^{conv} = D_t^{MC} (\bar{\mu}_{en}/\rho)_t^a \quad (II.1)$$

$$D_a^{conv} = D_t^{MC} (\bar{\mu}_{en}/\rho)_t^a \Psi_t^a \quad (II.2)$$

on D_a^{conv} és la dosi en aigua calculada a partir de la conversió de dosi en teixit, D_t^{MC} és la dosi en teixit calculada directament de la simulació Monte Carlo, $(\bar{\mu}_{en}/\rho)_t^a$ denota el quocient entre els coeficients d'absorció màssics de l'aigua i el teixit, i Ψ_t^a el quocient de fluències energètiques en aigua i teixit.

1.3.1 Paràmetres de simulació

Tal i com s’ha descrit a la secció 3.1, el transport d’electrons a PENELOPE ve caracteritzat per 5 paràmetres a ajustar per l’usuari. En aquest treball, el valor per a les energies d’absorció, tant per fotons com electrons, s’ha fixat a $E_{ABS} = 1$ keV, on s’han tingut en compte els espectres de les distintes fonts. Respecte C_1 i C_2 , el valor elegit per ambdues és de 0.05, els quals proporcionen un bon compromís entre velocitat i precisió al cas que ens ocupa. Finalment, s’han deshabilitat les col·lisions febles inelàstiques i radiatives emprant els corresponents valors de W_{cc} i W_{cr} , degut a la baixa energia dels espectres emprats.

El nombre de fotons incidents s’ha seleccionat a 10^9 per a totes les variants de la configuració de l’estudi, el que proporciona una incertesa de la dosi absorbida i de la fluència total del 0.5% i 0.01% respectivament.

Finalment, respecte als comptadors emprats per a registrar les mesures, s’ha emprat, en primer lloc, el “*tallyFluenceTrackLength*” per a registrar la fluència mitjana, per a cada segment d’energia, integrada al volum del detector. En aquest, s’ha seleccionat una amplada de segment energètic de $\Delta E = 0.25$ keV, que divideix l’interval $[E_{min}, E_{max}]$, on E_{min} i E_{max} venen determinats per les energies mínima i màxima de cada espectre emprat respectivament. Aquests llindars són, per a cada espectre,

- ^{103}Pd : $E_{min} = 0.5$ keV, $E_{max} = 497.08$ keV
- ^{125}I : $E_{min} = 0.5$ keV, $E_{max} = 35.492$ keV
- ^{131}Cs : $E_{min} = 0.5$ keV, $E_{max} = 34.419$ keV

En segon lloc, el “*tallySphericalDoseDistribution*” s’ha emprat per a registrar les dosis absorbides en aigua i en els diferents teixits estudiats. La descripció d’ambdós comptadors es troba a la secció 3.5.

1.4 Resultats

Per a comparar les dosis calculades i les seues variacions, s’han computat els quocients d’aquestes respecte a la dosi en aigua calculada a partir de la simulació Monte Carlo (D_a^{MC}).

Aquests resultats estan tabulats i representats a l’article adjunt. Es comprova, que els factors correctors de fluència energètica calculats proporcionen una relació més precisa entre dosi absorbida en aigua i dosi absorbida en teixit, per al rang de distàncies clínicament rellevants.

Tenint en compte els resultats, qualsevol SPT avançant, per exemple els basats en simulacions Monte Carlo, mostraran diferències significatives entre la dosi en teixit i dosi en aigua per a qualsevol font i teixit humà, especialment al cas d’os, per als quals la dosi absorbida arriba a ser 3.5

vegades major que la de l'aigua. No obstant, els factors calculats basats en els quocients de fluència energètica proporcionen un excel·lent estimador de la correcció necessària per a transformar D_a^{MC} en D_t^{MC} per a les fonts de ^{125}I , ^{131}Cs i ^{103}Pd emprades en aquest treball, amb una incertesa estadística per sota del 0.1%.

1.5 Article

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

Collision-kerma conversion between dose-to-tissue and dose-to-water by photon energy-fluence corrections in low-energy brachytherapy

Vicent Giménez-Alventosa¹, Paula C G Antunes^{1,2},
Javier Vijande^{1,3}, Facundo Ballester¹, José Pérez-
Calatayud^{4,5} and Pedro Andreo⁶

¹ Department of Atomic, Molecular, and Nuclear Physics, University of Valencia, E46100 Burjassot, Spain

² Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares—IPEN-CNEN/SP, São Paulo, Brazil

³ Instituto de Física Corpuscular (UV-CSIC), 46100 Burjassot, Spain

⁴ Radiation Oncology Department, La Fe University and Polytechnic Hospital, Valencia, Spain

⁵ Department of Radiotherapy, Clínica Benidorm, 03501 Benidorm, Spain

⁶ Department of Medical Physics, Karolinska University Hospital, SE-171 76 Stockholm, Sweden

E-mail: vijande@uv.es

Received 22 September 2016, revised 4 November 2016

Accepted for publication 23 November 2016

Published 16 December 2016



CrossMark

Abstract

The AAPM TG-43 brachytherapy dosimetry formalism, introduced in 1995, has become a standard for brachytherapy dosimetry worldwide; it implicitly assumes that charged-particle equilibrium (CPE) exists for the determination of absorbed dose to water at different locations, except in the vicinity of the source capsule. Subsequent dosimetry developments, based on Monte Carlo calculations or analytical solutions of transport equations, do not rely on the CPE assumption and determine directly the dose to different tissues. At the time of relating dose to tissue and dose to water, or vice versa, it is usually assumed that the photon fluence in water and in tissues are practically identical, so that the absorbed dose in the two media can be related by their ratio of mass energy-absorption coefficients. In this work, an efficient way to correlate absorbed dose to water and absorbed dose to tissue in brachytherapy calculations at clinically relevant distances for low-energy photon emitting seeds is proposed. A correction is introduced that is based on the ratio of the water-to-tissue photon energy-fluences. State-of-the art Monte Carlo calculations are used to score photon fluence differential in energy in water

and in various human tissues (muscle, adipose and bone), which in all cases include a realistic modelling of low-energy brachytherapy sources in order to benchmark the formalism proposed. The energy-fluence based corrections given in this work are able to correlate absorbed dose to tissue and absorbed dose to water with an accuracy better than 0.5% in the most critical cases (e.g. bone tissue).

Keywords: Monte Carlo, dosimetry, low-energy seed, collision-kerma, mass energy-absorption coefficients, energy-fluence correction factor

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The AAPM TG-43 brachytherapy dosimetry formalism, introduced in 1995 and modified subsequently in various publications (Nath *et al* 1995, Rivard 2004, 2007, Rivard *et al* 2010), has become a standard for brachytherapy dosimetry worldwide. This formalism implicitly assumes that a seed is embedded in an infinite water medium and, consequently, charged-particle equilibrium (CPE) exists (except at short distances from the source capsule). At low photon energies the radiation yield of the photon-generated electrons is practically negligible; absorbed dose can, therefore, be approximated by collision kerma. Monte Carlo and experimentally derived TG-43 consensus datasets for both high- and low-energy sources have been extensively derived in the literature based on these approximations (Dolan *et al* 2006, Rivard *et al* 2006, Sowards 2007, Perez-Calatayud *et al* 2012).

Currently, most of the clinical experience is mainly based on TG-43, i.e. absorbed dose-to-water in water. However, it is well known that the TG-43 assumptions may not be accurate in some clinical situations (Carlsson-Tedgren and Alm-Carlsson *et al* 2013). This is particularly true for the combination of low-energy photons (<100 keV) and some tissues as bone, for which the ratio of mass energy-absorption coefficients $(\mu_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ are significantly different from unity. The high-Z elements found in bone structures make the photoelectric effect to be the predominant interaction, leading to a higher absorption of low-energy photons and therefore hardening the photon spectrum as it goes deeper on the body (Fonseca *et al* 2015). Body-air interfaces, like those observed in breast or lung lesions, are another clinical situations where TG-43 assumptions are not valid (Afsharpour *et al* 2011, Landry *et al* 2011, Sutherland *et al* 2012).

In this context, state-of-the-art model-based dose calculations algorithms (MBDCAs) (Beaulieu *et al* 2012) such as Monte Carlo (MC) and analytical models like ACE (advanced calculation engine—nucletron—an Elekta Company, Veenendaal, The Netherlands) (Carlsson-Tedgren and Ahnesjö 2008, Ahnesjö 2013, Van Veelen *et al* 2014) and ACUROSTM (Transpire Inc., Gig Harbor, WA) (Petrokokkinos *et al* 2011, Lloyd and Ansbacher 2013), both for HDR applications with ¹⁹²Ir, have become available in brachytherapy. They are considered by AAPM TG-186 as potential replacements of the TG-43 formalism. MBDCAs are capable of handling tissue compositions/densities and other treatments complexities leading to the determination of dose-to-tissue. Tissue compositions/densities can be obtained from dual-CT procedures, or from single-CT using a lookup table, although constraints on the current procedures for tissue segmentation have been pointed out by Andreo (2015) for tissues having identical or very similar density.

The relation between dose-to-tissue and dose-to-water, or vice versa, has been the subject of some recent publications in order to associate all previous clinical experience based on dose-to-water with the new methodologies based on dose-to-tissue. See Beaulieu *et al* (2012), Andreo (2015), Ballester *et al* (2015), Kumar *et al* (2016), and references therein.

Usually, absorbed dose calculations are performed using cavity theory in which the cavity dimensions are compared to the ranges of secondary electrons (Attix 1986). When the cavity is larger than the range of secondary electrons, the absorbed dose to non-water tissue is estimated using ratios of mass energy-absorption coefficients between water and tissue (Landry *et al* 2011, Carlsson-Tedgren and Alm-Carlsson *et al* 2013), on the assumption that the photon energy-fluence at the point of interest is practically the same for water and for the different human tissues.

The purpose of this work is to study the influence of photon energy-fluence in different media and to evaluate a proposal for energy-fluence correction factors for the conversion between dose-to-tissue and dose-to-water. For this goal, Monte Carlo simulations for a subset of human tissues of interest in brachytherapy for three low-energy brachytherapy seeds (^{103}Pd , ^{125}I , and ^{131}Cs) have been performed.

2. Materials and methods

This section describes the methodology employed to convert absorbed dose to a tissue (D_{tis}) into absorbed dose to water (D_{w}) using the large-cavity theory and how Monte Carlo calculations have been carried out. The method is also applicable to the reverse conversion, i.e. from D_{w} to D_{tis} , after the proper reversal of subscripts.

2.1. Relation between D_{w} and D_{tis}

At this point it should be emphasized that the conversion between D_{tis} and D_{w} is required mainly due to:

- (a) most treatment planning systems (TPS) calculate D_{w} , hence currently available clinical experience is mostly based on D_{w} ;
- (b) advanced developments in absorbed dose calculation methods (e.g. MBDCAs) are able to determine accurately D_{tis} assuming that a valid characterization of tissues from dual-CT procedures or from a lookup density-tissue table has been made;
- (c) a comparison between D_{tis} obtained by MC calculations with D_{w} calculated with conventional TPS, and their transfer method, or vice versa, is necessary to take into account D_{w} -based previous clinical experience.

TG-43 photon brachytherapy dosimetry assumes that:

- (1) The source is located in an infinite water medium and CPE exists (except in the vicinity of the source capsule).
- (2) The absorbed dose to a point in tissue located in such a water infinite medium, D_{tis} , is approximated by the collision kerma, $(K_{\text{col}})_{\text{tis}}$, at the same point, i.e.:

$$D_{\text{tis}} \stackrel{\text{CPE}}{=} (K_{\text{col}})_{\text{tis}} = \Psi_{\text{tis}} (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}} \quad (1)$$

where $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}$ is the mass energy-absorption coefficient, averaged over the photon energy-fluence spectrum, and $\Psi_{\text{tis}} = \int_E \Psi_E^{\text{tis}} dE$ is the total photon energy-fluence, with

$$\Psi_E^{\text{tis}} = \left. \frac{d\Psi}{dE} \right|_{\text{tis}} = E \Phi_E^{\text{tis}} = E \left. \frac{d\Phi}{dE} \right|_{\text{tis}} \quad (2)$$

Φ_E^{tis} being the photon fluence spectrum, differential in energy, at the point of interest in tissue.

- (3) The relation between dose-to-water, D_w , and dose-to-tissue D_{tis} can therefore be written as

$$\frac{D_w}{D_{\text{tis}}} = \frac{\Psi_w (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_w}{\Psi_{\text{tis}} (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}} \quad (3)$$

where Ψ_w and Ψ_{tis} are the total photon energy-fluences in water and in tissue, respectively, and $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_w$ and $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}$ are the mass energy-absorption coefficients of water and tissue, averaged over the local photon energy-fluence.

- (4) Assuming, as it is widely done, that the photon energy-fluence at the point of interest is practically the same in tissue and in water, i.e. that the ratio $\Psi_w/\Psi_{\text{tis}} \cong 1$, equation (3) becomes:

$$\frac{D_w}{D_{\text{tis}}} = (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w \quad (4)$$

where $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$ is the ratio of mass energy-absorption coefficients of water and tissue, averaged over the local photon energy-fluence.

- (5) If, on the other hand, the photon energy-fluence depends on the medium at the point of interest, the ratio Ψ_w/Ψ_{tis} needs to be taken into account, so that equation (3) can be written as:

$$\frac{D_w}{D_{\text{tis}}} = \Psi_{\text{tis}}^w (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w \quad (5)$$

where Ψ_{tis}^w is the ratio of the total photon energy-fluences in water and tissue, which in this work is termed the *water-to-tissue photon energy-fluence correction factor*, and $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$ has the same meaning as above.

We will henceforth explore the relations (4) and (5) for various human body tissues in the energy region of interest for certain brachytherapy sources. To do so, we will compute D_w , D_{tis} , Ψ_{tis}^w , and $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$ as described in what follows.

2.2. Monte Carlo calculations

MC calculations were performed using the PENELOPE MC system version 2014 (Salvat 2014), henceforth referred to as PEN14, which accurately models photon and electron interactions in an arbitrary material for the energy range of interest in this work. This system has already been successfully applied for dosimetric studies in the field of brachytherapy (Granero *et al* 2011). A comparison of PENELOPE MC results with experimental data has been reported elsewhere (Sempau *et al* 2003). PEN14 photon cross-sections for Rayleigh scattering are extracted from the EPDL97 cross sections library (Cullen *et al* 1997, Perkins *et al* 2001). For incoherent (Compton) scattering PENELOPE uses the impulse approximation of Ribberfors (1975), which includes binding effects and Doppler broadening, i.e. for a given scattering angle, the cross section yields a photon energy distribution rather than the single photon energy resulting from the scattering of a photon with a free electron (the classical *Compton line*). Photoelectric cross-sections are calculated with the program *photoabs* (Sabbatucci and Salvat 2016), which uses the same theory as in the re-normalized calculations

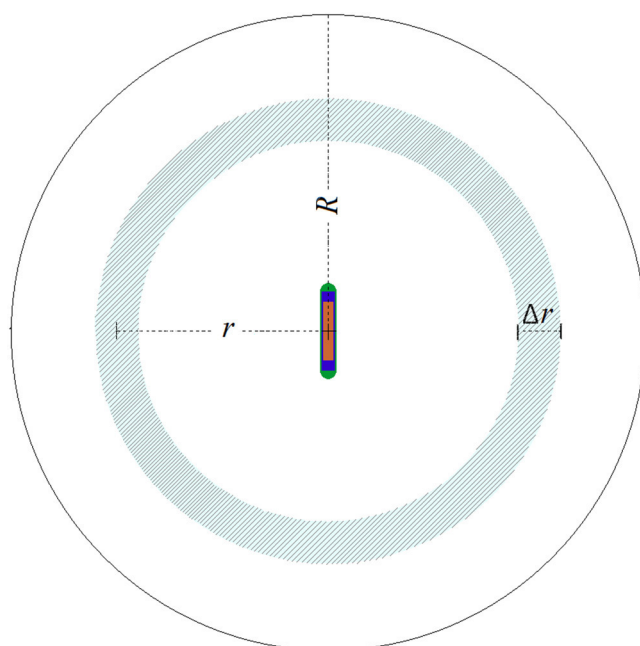


Figure 1. Schematic illustration of the simulation geometry, the size of the phantom is a water sphere with $R = 30$ cm, the thickness of the detectors is $\Delta r = 0.2$ cm, and the source-centre to detector distance r is 1 cm or 5 cm (figure not to scale).

by Scofield (1978), but implementing more accurate numerical algorithms and an extended energy range. A comparison of mass energy-absorption coefficients for different materials using this photon dataset and values from other libraries (e.g. the widely used NIST database, see www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients) has been described by Andreo *et al* (2012). Electron cross-sections are directly calculated by the PENELOPE data generation code *pendbase* and, for this work, updated mean excitation energies (I -values) and mass density for water and carbon have been used for the evaluation of the density effect in stopping power calculations (Andreo *et al* 2013, ICRU 2016).

2.2.1. Low-energy brachytherapy seeds. Three brachytherapy low-energy seeds have been investigated in this study:

- (1) Model IAPd -103A ^{103}Pd source (IsoAid LLC, Port Richey, FL, USA),
- (2) Model 6711 ^{125}I source (GE Healthcare, IL. Marketed by Oncura, Inc), and
- (3) Model Cs-1 Rev2 ^{131}Cs source (IsoRay Medical, Richland, WA).

The seeds were modelled according to published descriptions (Dolan *et al* 2006, Rivard 2007, Sowards 2007) and the primary radionuclide spectra were obtained from the USA national nuclear data center (NNDC); the mean photon energies for the ^{103}Pd , ^{125}I and ^{131}Cs spectra are 20.8 keV, 28.5 keV and 30.4 keV, respectively (Baglin 2012).

2.2.2. Materials and geometry of the Monte Carlo calculations. Figure 1 shows the geometric modelling used for the study, which consists of an ‘infinite’ water sphere ($R = 30$ cm) containing a spherical shell detector of thickness $\Delta r = 0.2$ cm (hatched area) with the seed located at its centre. The shell thickness corresponds approximately to the continuous

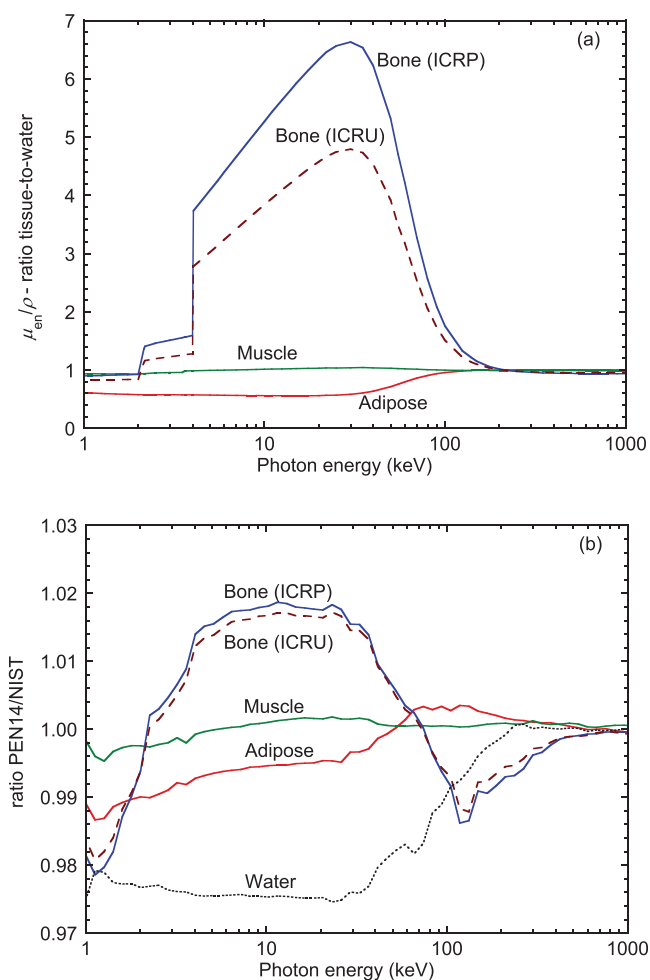


Figure 2. (a) Mass energy-absorption coefficients of various human tissues relative to water calculated in this work using the *mutren* code of the PENELOPE 2014 MC system (Salvat 2014), as a function of the photon energy. (b) Quotients of the PEN14 ratios to the corresponding NIST values (Seltzer, private communication); μ_{en}/ρ -ratios for water in the two databases, where the NIST data correspond to the non-re-normalized values given in ICRU (2016), are included for completeness.

slowing down range in water of the maximum possible electron energy of the ^{103}Pd source ($R_{\text{CSDA},497\text{ keV}} = 0.18\text{ cm}$). In this study, two different ‘detector’ locations were used. In the first one, the detector was located at a distance $r = 1\text{ cm}$ of the seed centre (the typical prescription distance), and in the second one at a distance $r = 5\text{ cm}$ (a typical distance for the organs at risk). These detectors were used to score photon energy-fluence spectra differential in energy and absorbed doses in the MC calculations.

The material of the spherical detectors were water and four human tissues of interest in brachytherapy: muscle, adipose tissue and two types of bone, cortical bone with composition from ICRP (2009) and skeletal bone from ICRU (1992). The reason for including two different bone compositions is due to the significant difference between mass energy-absorption coefficients in relation to water despite having the same mass density (see figure 2). The same

Table 1. Materials composition (in fraction by weight) and relevant atomic properties.

Material	Water	Muscle	Adipose tissue	Cortical bone (ICRP)	Skeletal bone (ICRU)
H	1.12×10^{-1}	1.01×10^{-1}	1.19×10^{-1}	4.72×10^{-2}	6.39×10^{-2}
C	—	1.08×10^{-1}	6.37×10^{-1}	1.44×10^{-1}	2.78×10^{-1}
N	—	2.77×10^{-2}	7.97×10^{-3}	4.19×10^{-2}	2.70×10^{-2}
O	8.80×10^{-1}	7.55×10^{-1}	2.32×10^{-1}	4.46×10^{-1}	4.10×10^{-1}
Mg	—	1.90×10^{-4}	2.00×10^{-5}	2.20×10^{-3}	2.00×10^{-3}
P	—	1.80×10^{-3}	1.60×10^{-4}	1.05×10^{-1}	7.00×10^{-2}
S	—	2.41×10^{-3}	7.30×10^{-4}	3.15×10^{-3}	2.00×10^{-3}
Cl	—	7.90×10^{-4}	1.19×10^{-3}	—	—
K	—	3.02×10^{-3}	3.20×10^{-4}	—	—
Ca	—	3.00×10^{-5}	2.00×10^{-5}	2.09×10^{-1}	1.47×10^{-1}
Others	—	6.00×10^{-5}	5.00×10^{-4}	4.55×10^{-3}	1.00×10^{-4}
$\rho Z/A$	0.5540	0.5714	0.5138	0.9644	0.9807
Density (g cm^{-3})	0.998	1.04	0.92	1.85	1.85
I -value (eV)	78	75.3	63.2	106.4	91.9

is true for the different electron mass stopping powers and scattering power of the two bone tissues where, due to their different atomic composition, electron density and mean excitation energy, the quantities $(S/\rho)_{\text{bone}}$ and $(T/\rho)_{\text{bone}}$ are quite different. The required tissue/material data files for this work were consistently created using the PENELOPE/ *pendbase* code. The atomic composition, mass density and I -values of each material are given in table 1.

2.2.3. Monte Carlo simulation parameters. The electron-transport algorithm in PENELOPE is governed by five user-defined simulation parameters for each material, namely E_{ABS} , C_1 , C_2 , W_{CC} , and W_{CR} :

- Parameter E_{ABS} defines when the track evolution stops and the kinetic energy of the particle is deposited locally. (A corresponding parameter is used for photon transport, see below).
- Parameters C_1 and C_2 correspond to the average angular deflection and the maximum average fractional energy loss per step, respectively, and they were set to 0.05 as recommended by the user manual for an optimal compromise between calculation speed and accuracy.
- Parameters W_{CC} and W_{CR} specify the energy cut-offs for hard inelastic and radiative collisions, respectively; both were set to 0.

Photons and electrons were transported down to an energy cut-off $E_{\text{ABS}} = 1 \text{ keV}$. The number of incident photons was set to 10^9 for all calculations, so that the Type A standard uncertainties of the MC-scored absorbed dose and of the total fluence were 0.5% and 0.01%, respectively, the latter being estimated from the propagation of the uncertainties of each fluence bin.

2.2.4. Estimators of photon energy-fluence spectra and absorbed dose. The PenEasy user code (Sempau *et al* 2011), based on the PENELOPE system, was used to perform the MC calculations. Two tallies were employed:

- The ‘tallyFluenceTrackLength’ was used to calculate the average photon track-length spectra within the detector volume, whose output is given multiplied by the detector

volume, $V\Phi_E$, V being the detector volume (the score was subsequently divided by V). Photon fluence spectra Φ_E in water and in each tissue were scored for $\Delta E = 0.25$ keV from E_{\min} to E_{\max} , the minimum and the maximum energies of each incident seed spectrum. Subsequently, the energy-fluence differential in energy Ψ_E was determined from Φ_E (see equation (2)).

- The ‘tallySphericalDoseDistribution’ was used to score the absorbed doses D_w and D_{tis} inside the two detector volumes.

Additionally, the *mutren* code of PENELOPE was used to calculate μ_{en}/ρ for water and each tissue for the energy of each bin, E_i .

2.3. Ratios of mass energy-absorption coefficients of water and tissue and photon energy-fluence spectra

Using the equations given in section 2.1 together with the MC-scored quantities obtained as described in section 2.2, the ratio water-to-tissue of the energy-fluence weighted average mass energy-absorption coefficients were evaluated according to:

$$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}} = \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{w}} [\mu_{\text{en}}(E_i) / \rho]_{\text{w}} dE}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{w}} dE} \cong \frac{\sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{w}} [\mu_{\text{en}}(E_i) / \rho]_{\text{w}}}{\sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{w}}} \quad (6)$$

$$\frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{tis}} [\mu_{\text{en}}(E_i) / \rho]_{\text{tis}} dE}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{tis}} dE} \cong \frac{\sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{tis}} [\mu_{\text{en}}(E_i) / \rho]_{\text{tis}}}{\sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{tis}}}$$

where $\Psi_{E_i}^{\text{w}}$ and $\Psi_{E_i}^{\text{tis}}$ are the energy-fluence distributions in water and tissue, respectively, and n is the number of energy bins required to cover the energy range using $\Delta E = 0.25$ keV.

Following the same procedure, the values of the $\Psi_{\text{tis}}^{\text{w}}$ -ratios were calculated using

$$\Psi_{\text{tis}}^{\text{w}} = \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{w}} dE}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Psi_E^{\text{tis}} dE} \cong \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{w}}}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Psi_{E_i}^{\text{tis}}} \quad (7)$$

Taking into account the uncertainty of the MC-calculated total fluences in water and in tissue, a conservative estimate for the Type A standard uncertainty of the water-to-tissue photon energy-fluence correction factor is 0.02%.

3. Results and discussion

The PEN14-calculated mass energy-absorption coefficients of the human tissues relative to those of water are shown in figure 2(a) as a function of the photon energy. For comparison, the quotient between the data from PEN14 and the corresponding NIST-values (Seltzer, private communication; note that the ICRP tissue compositions used in this work are not included in the web-based NIST database) is presented in figure 2(b), which shows discrepancies of up to $\pm 2\%$ mostly for the two bone tissues. It should be noted that the differences shown in the latter figure are not solely due to the photoeffect cross sections in each dataset, re-normalized in PEN14 and non-re-normalized in NIST, but also to the use of the impulse approximation for Compton scattering and its account for Doppler broadening in PENELOPE whereas the NIST data uses the Klein–Nishina kinematics relationship for the scattered photon (Compton

line). Both datasets incorporate binding effects. For completeness, figure 2(b) also includes the ratios PEN14/NIST for water, where the NIST data correspond to the non-re-normalized XCOM values given in ICRU (2016).

The PEN14 calculated values have been used in combination with the photon energy-fluence spectra calculated in the ‘detectors’ at a distance of 1 cm and 5 cm from the seed centre. The energy-fluence weighted average mass energy-absorption coefficients ratios were calculated according to equation (6) using the following energy limits for each source:

- (1) ^{103}Pd : $E_{\min} = 0.5 \text{ keV}$ and $E_{\max} = 497.08 \text{ keV}$
- (2) ^{125}I : $E_{\min} = 0.5 \text{ keV}$ and $E_{\max} = 35.492 \text{ keV}$
- (3) ^{131}Cs : $E_{\min} = 0.5 \text{ keV}$ and $E_{\max} = 34.419 \text{ keV}$

and the results are summarized in table 2.

For the PEN14 calculated photon spectra, differences in the energy-fluence weighted average $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$, see equation (6), using PEN14 and NIST μ_{en}/ρ data, vary within -2.1% (^{125}I , bone ICRP) and 0.7% (^{125}I , adipose tissue), with an overall mean difference of -0.9% . It should be noted, however, that the resulting Type B uncertainty due to this mean difference ($u_{\text{B},95\% \text{ c.l.}} \approx 0.7\%$, see Andreo *et al* (2012)) is applicable to the values in table 2, but does not play a significant role in the energy-fluence correction factors obtained from equation (7), as these depend on the MC-calculated photon spectra, which are expected to be approximately similar using both datasets, but not on μ_{en}/ρ values. Resolving this approximation would require two MC spectra calculations (for each case) with the same MC code but using different photon cross sections, a task beyond the scope of the present work.

Energy-fluence ratios $\Psi_{\text{tis}}^{\text{w}}$ obtained using equation (7) are given in table 3, where it can be seen that only the muscle/water ratios are approximately close to one. For the different sources and the two distances, in adipose tissue the energy-fluence ratio to water varies within about -3% and -1% , but it varies up to within 20% and 50% (ICRU), and to within 26% and 72% (ICRP), for the two bone compositions. Such large differences show that the common assumption of considering approximately equal the fluences in water (or in a soft tissue like muscle) and in bone, that provides the basis for a dose ratio equal to that of the mass energy-absorption coefficients (see equation 4), is a poor approximation for high- Z tissues. Note that the results for the two different compositions of bone, both with the same density, question the adequacy of density versus tissue lookup tables for tissue characterization (see Andreo (2015)).

The proposal in this work is therefore to include a photon energy-fluence correction factor $\Psi_{\text{tis}}^{\text{w}}$ to account for the fluence difference in two media according to equation (5). This correction parallels the proposal made by Andreo (2015) for megavoltage photon beams, where an electron fluence correction was introduced for the tissues used in the present work. The correction factors are however, substantially larger in the case of low-energy photons used in brachytherapy than in megavoltage photons.

Recall that our goal is to determine a ‘converted’ absorbed dose to water, $D_{\text{w}}^{\text{conv}}$, using an advanced TPS-calculated $D_{\text{tis}}^{\text{TPS}}$, e.g. by MC simulation, that is, one deals with a process $D_{\text{tis}}^{\text{MC}} \rightarrow D_{\text{w}}^{\text{conv}}$. The two approximations given in equations (4) and (5) can, respectively, be written for this process as

$$D_{\text{w}}^{\text{conv}} = D_{\text{tis}}^{\text{MC}} (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}} \quad (8)$$

and

$$D_{\text{w}}^{\text{conv}} = D_{\text{tis}}^{\text{MC}} (\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}} \Psi_{\text{tis}}^{\text{w}} \quad (9)$$

Table 2. Energy-fluence weighted average mass energy-absorption coefficients of different tissues, and their ratio relative to that of water, evaluated for the ^{125}I , ^{131}Cs and ^{103}Pd spectra. The estimated standard uncertainty of the $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ values is 0.7%.

Materials	1 cm						5 cm					
	^{125}I	^{131}Cs	^{103}Pd	^{125}I	^{131}Cs	^{103}Pd	^{125}I	^{131}Cs	^{103}Pd	^{125}I	^{131}Cs	^{103}Pd
	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)	$(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ ($\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$)
Water	0.218	1.000	0.492	1.000	1.000	1.000	0.212	1.000	0.173	1.000	1.000	0.387
Muscle	0.227	0.961	0.509	0.967	0.960	0.967	0.220	0.961	0.180	0.961	0.961	0.400
Adipose	0.125	1.734	0.278	1.770	1.711	1.770	0.122	1.729	0.100	1.715	1.715	0.221
Bone (skeletal, ICRU)	1.016	0.214	2.237	0.220	0.210	0.220	0.982	0.216	0.807	0.214	1.595	0.242
Bone (cortical, ICRP)	1.391	0.156	3.066	0.160	0.153	0.160	1.344	0.157	1.105	0.156	2.101	0.184

Table 3. Energy-fluence weighted average photon total energy-fluence and energy-fluence correction factors for different tissues, evaluated for the ^{125}I , ^{131}Cs and ^{103}Pd spectra. The estimated Type A standard uncertainty of the Ψ_{tis}^w values is 0.02%.

	1 cm						5 cm					
	^{125}I		^{131}Cs		^{103}Pd		^{125}I		^{131}Cs		^{103}Pd	
	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)	Ψ (eV cm $^{-2}$)	Ψ_{tis}^w (eV cm $^{-2}$)
Water	917.2	1.000	1263	1.000	459.6	1.000	14.19	1.000	24.91	1.000	2.240	1.000
Muscle	915.6	1.002	1261	1.001	457.8	1.004	14.14	1.003	24.84	1.003	2.230	1.003
Adipose	930.0	0.986	1275	0.990	474.2	0.969	14.48	0.979	25.36	0.982	2.310	0.970
Bone (skeletal, ICRU)	742.1	1.236	1070	1.180	307.8	1.493	10.89	1.302	19.68	1.266	1.600	1.397
Bone (cortical, ICRP)	683.0	1.343	999.8	1.263	266.6	1.724	9.940	1.427	18.11	1.376	1.440	1.555

Table 4. Data for MC-calculated ratio $\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}$ and the approximations of equation (10), $\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w$, and equation (11), $\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w$ for the spectra of ^{125}I , ^{131}Cs and ^{103}Pd seeds at 1 cm.

Materials	1 cm											
	^{125}I				^{131}Cs				^{103}Pd			
	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w$	$\frac{D_{MC}^{MC}}{D_w^{MC}}(\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w$
Muscle	1.038	0.997	0.999	1.041	0.999	1.041	0.999	1.000	1.031	0.997	1.000	
Adipose	0.585	1.015	1.001	0.592	1.012	0.592	1.012	1.002	0.584	1.034	1.003	
Bone (skeletal, ICRU)	3.761	0.806	0.996	4.023	0.845	4.023	0.845	0.998	3.035	0.667	0.997	
Bone (cortical, ICRP)	4.739	0.742	0.996	5.164	0.789	5.164	0.789	0.998	3.600	0.578	0.996	

Table 5. Data for MC-calculated ratio $\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}$ and the approximations of equation (10), $\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}(\bar{f}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$, and equation (11), $\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}(\bar{f}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w \Psi_{\text{tis}}^w$ for the spectra of ^{125}I , ^{131}Cs and ^{103}Pd seeds at 5 cm.

Materials	5 cm					
	^{125}I		^{131}Cs		^{103}Pd	
	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}$	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}(\bar{f}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}$	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}(\bar{f}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w$	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}$	$\frac{D_{\text{tis}}^{\text{MC}}}{D_w^{\text{MC}}}(\bar{f}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^w \Psi_{\text{tis}}^w$
Muscle	1.037	0.997	1.038	0.998	1.029	1.000
Adipose	0.591	1.022	0.594	1.019	0.594	1.011
Bone (skeletal, ICRU)	3.548	0.766	3.678	0.787	2.916	0.988
Bone (cortical, ICRP)	4.426	0.698	4.637	0.725	3.445	0.987

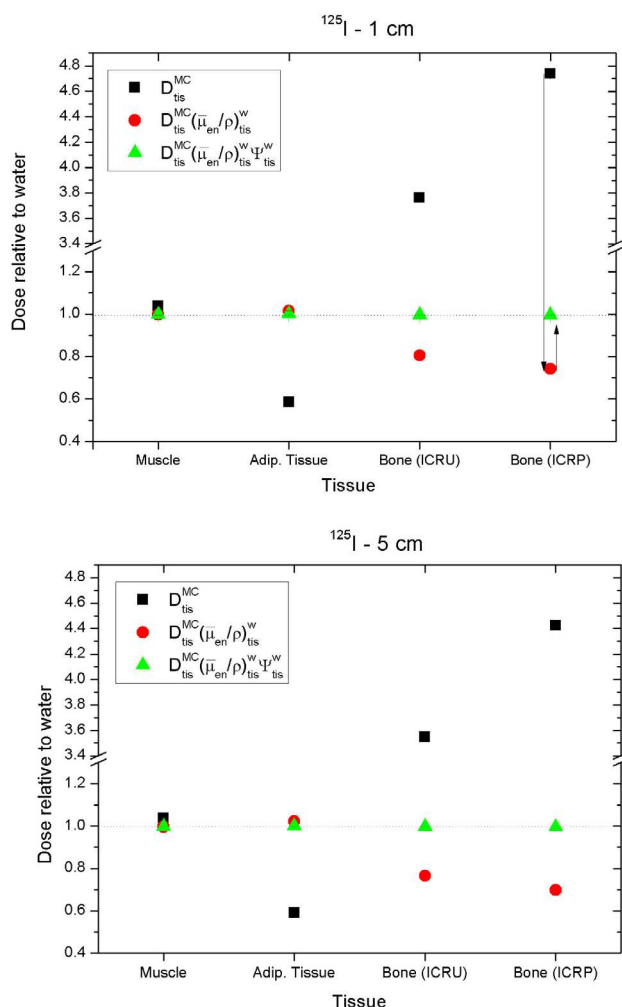


Figure 3. Ratio between D_{tis}^{MC} and D_w^{MC} and the corrections given in equations (10) and (11) for the ^{125}I source. The ratios of the Monte Carlo-scored D_{tis}^{MC} and D_w^{MC} are shown as black squares. Correcting their quotient with the ratio of mass energy-absorption coefficients water-to-tissue yields the red circles. The additional correction with the energy-fluence corrections proposed in this work yields the results shown as green triangles. Type A uncertainties for all the absorbed dose ratios are of the order of 0.5%. The arrows in the upper panel for bone (ICRP) illustrate the trend of dose relative to water when the two different corrections are applied.

where the meaning of the different quantities has been described before.

To verify the validity of each approximation we have also scored D_w^{MC} in our MC calculations, so that the converted D_w^{conv} can be compared with this ‘reference’ D_w^{MC} . An ideal conversion should yield a ratio $D_w^{conv}/D_w^{MC} \approx 1$. This ratio can be expressed for both approximations as

$$\frac{D_w^{conv}}{D_w^{MC}} = \frac{D_{tis}^{MC}}{D_w^{MC}} (\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \tag{10}$$

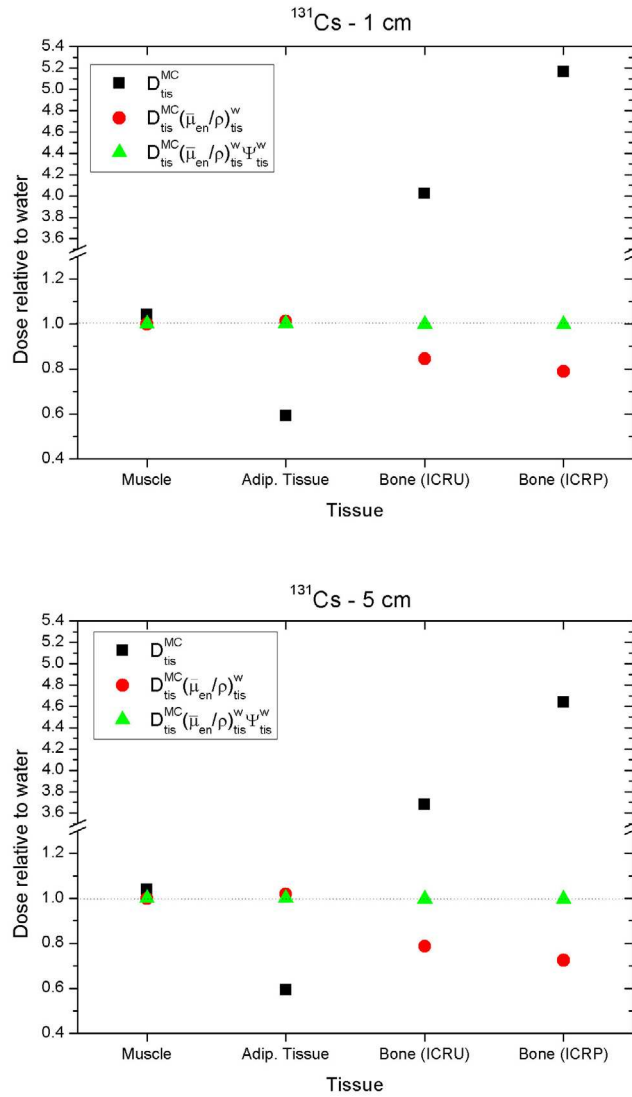


Figure 4. Ratio between D_{tis}^{MC} and D_w^{MC} and the corrections given in equations (10) and (11) for the ^{131}Cs source. The ratios of the Monte Carlo-scored D_{tis}^{MC} and D_w^{MC} are shown as black squares. Correcting their quotient with the ratio of mass energy-absorption coefficients water-to-tissue yields the red circles. The additional correction with the energy-fluence corrections proposed in this work yields the results shown as green triangles. Type A uncertainties for all the absorbed dose ratios are of the order of 0.5%.

and

$$\frac{D_w^{conv}}{D_w^{MC}} = \frac{D_{tis}^{MC}}{D_w^{MC}} (\bar{\mu}_{en}/\rho)_{tis}^w \Psi_{tis}^w \quad (11)$$

where all the quantities in the right hand side of both expressions have been derived using our Monte Carlo simulations.

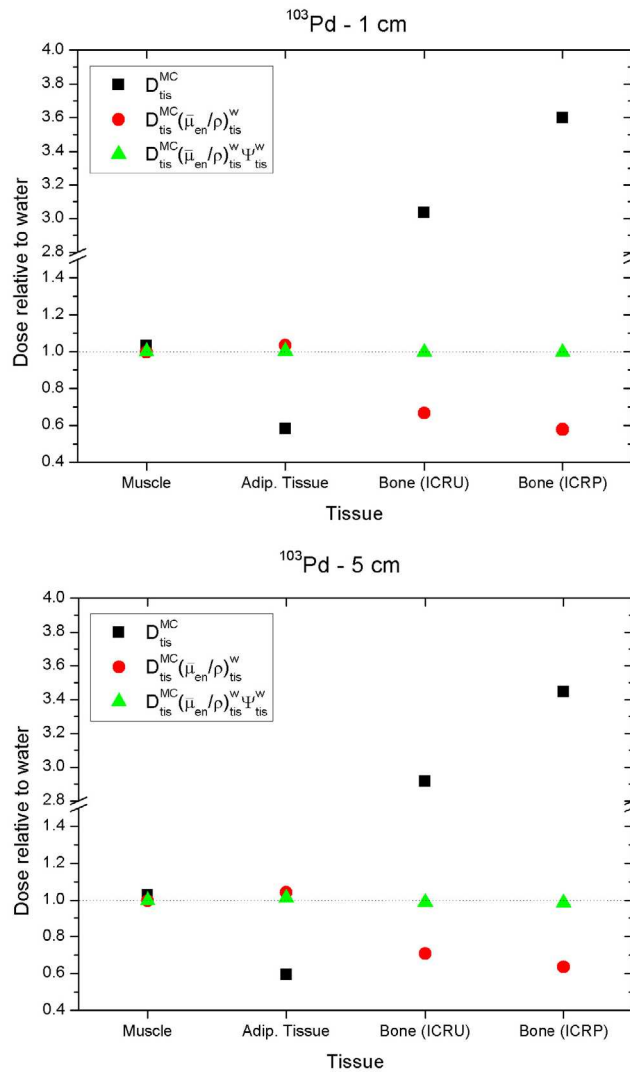


Figure 5. Ratio between $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}$ and D_w^{MC} and the corrections given in equations (10) and (11) for the ^{103}Pd source. The ratios of the Monte Carlo-scores $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}$ and D_w^{MC} are shown as black squares. Correcting their quotient with the ratio of mass energy-absorption coefficients water-to-tissue yields the red circles. The additional correction with the energy-fluence corrections proposed in this work yields the results shown as green triangles. Type A uncertainties for all the absorbed dose ratios are of the order of 0.5%.

It is emphasized that the flow of steps described above is also valid for the inverse process based on a conventional TPS, i.e. $D_w^{\text{TPS}} \rightarrow D_{\text{tis}}^{\text{conv}}$, by making a proper change of the indices involved.

Results for the approximations relating the ratio $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}/D_w^{\text{MC}}$ of the MC-calculated doses with the corresponding equations (10) and (11), for the spectra from the ^{125}I , ^{131}Cs , and ^{103}Pd sources, and at the distances of 1 cm and 5 cm, are given in tables 4 and 5, respectively. It can be seen that the correction of equation (11) provides dose ratios $D_w^{\text{conv}}/D_w^{\text{MC}}$ close to one within

a few tenths of a per cent. The results are also displayed in figures 3–5 for easier visualization, where the top panel of figure 3 illustrates the transition (see the arrows for bone (ICRP), considered to be the most critical case) from the MC-calculated $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}/D_{\text{w}}^{\text{MC}}$ to $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}/D_{\text{w}}^{\text{MC}}$ and to $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}\Psi_{\text{tis}}^{\text{w}}/D_{\text{w}}^{\text{MC}}$.

As an additional verification, the absorbed dose to water and tissues determined using the integral form of equation (1)

$$D_{\text{med}} \cong \int_{E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} \Psi_E^{\text{med}} [\mu_{\text{en}}(E)/\rho]_{\text{med}} dE \quad (12)$$

has been evaluated for the MC-calculated energy-fluence spectra Ψ_E^{med} for each source and the $[\mu_{\text{en}}(E)/\rho]_{\text{med}}$ values used throughout this work. The ratios of this ‘large-cavity theory’ D_{med} to the directly MC-calculated $D_{\text{med}}^{\text{MC}}$ agree on the average within 0.2%, the range being (–2.5%, +0.7%) with the largest difference corresponding to ^{103}Pd and adipose tissue at 5 cm. The corresponding Type B standard uncertainty estimate of the D_{med} values is 0.8%, this being also a conservative estimate of the dose ratios $D_{\text{med}}^{\text{MC}}/D_{\text{w}}^{\text{MC}}$ in tables 4 and 5 due to the correlation of the two quantities (same method and MC code).

The different dose ratios have been analysed at 1 cm and 5 cm from the source centre in order to distinguish whether the proposed corrections could be used for clinically relevant distances, less than 5 cm from the source. The results obtained show that the calculated energy-fluence correction factors can be used to establish a relationship between absorbed dose to tissue and absorbed dose to water for a broad range of clinically relevant distances.

As expected, any advanced TPS based e.g. on a MC simulation, will yield significant differences between $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}$ and D_{w}^{MC} for all sources and tissues, especially for bone. $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}$ values can be approximately 3.5 times higher than D_{w}^{MC} for the two types of bone tissue (ICRP and ICRU compositions). The energy-fluence based correction proposed in equation (11) provides an excellent estimation of the correction needed to the ratio $D_{\text{tis}}^{\text{MC}}/D_{\text{w}}^{\text{MC}}$ for the ^{125}I , ^{131}I and ^{103}Pd sources used in this work and for all clinically relevant distances with an standard uncertainty estimate better than 0.1%. Taking into account this estimate and that of the dose ratios ($\sim 0.8\%$) and of the $(\bar{\mu}_{\text{en}}/\rho)_{\text{tis}}^{\text{w}}$ values ($\sim 0.7\%$), the combined standard uncertainty for the entire set of calculations in this work is about 1%, of which only one tenth corresponds to the proposed water-to-tissue photon energy-fluence correction factor.

4. Conclusions

A photon energy-fluence based correction has been proposed that represents an straightforward and efficient procedure to correlate absorbed dose to water and absorbed dose to tissue in brachytherapy calculations for clinically relevant distances and radionuclides. Its rationale is that photon fluence varies in different media, particularly between water and high- Z tissues like bone; for adipose tissues the differences are much smaller but still worth correcting for. The corrections provided can be implemented in any treatment planning system and be easily extended to other distances, sources and/or radionuclides by performing a detailed MC simulation following the procedures outlined in this work. For the new MBDCa calculation techniques, photon fluence estimators can be included in the calculation process so that both absorbed dose and photon fluence are scored simultaneously; outputs can then be given in terms of dose to tissue and of dose to water in an accurate way.

Acknowledgments

This work was supported in part by Generalitat Valenciana under Project PROMETEOIII/2013/010, by the Spanish Government under Project No. FIS2013-42156. PCGA is grateful to acknowledge CNPq-Brazil for a research fellowship. S. Seltzer is gratefully acknowledged for providing μ_{en}/ρ data for the different tissues calculated according to the NIST database.

References

- Afsharpour H *et al* 2011 Tissue modelling schemes in low energy breast brachytherapy *Phys. Med. Biol.* **56** 7045–60
- Ahnesjö A 2013 Collapsed cone convolution of radiant energy for photon dose calculation in heterogeneous media *Med. Phys.* **16** 577–92
- Andreo P 2015 Dose to ‘water-like’ media or dose to tissue in MV photons radiotherapy treatment planning: still a matter of debate *Phys. Med. Biol.* **60** 309–337
- Andreo P 2015 Dose to ‘water-like’ media or dose to tissue in MV photons radiotherapy treatment planning: still a matter of debate *Phys. Med. Biol.* **60** 2619 (corrigendum)
- Andreo P, Burns D T and Salvat F 2012 On the uncertainties of photon mass energy-absorption coefficients and their ratios for radiation dosimetry *Phys. Med. Biol.* **57** 2117–36
- Andreo P, Wulff J, Burns D T and Palmans H 2013 Consistency in reference radiotherapy dosimetry: resolution of an apparent conundrum when ^{60}Co is the reference quality for charged-particle and photon beams *Phys. Med. Biol.* **58** 6593–621
- Attix F H 1986 *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry* (New York: Wiley)
- Baglin C M 2012 Nuclear data sheets for $A = 192$ *Nucl. Data Sheets* **113** 1871–2111
- Ballester F *et al* 2015 A generic high-dose rate ^{192}Ir brachytherapy source for evaluation of model-based dose calculations beyond the TG-43 formalism *Med. Phys.* **42** 3048–62
- Beaulieu L *et al* 2012 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 *Med. Phys.* **39** 6208–36
- Carlsson-Tedgren A and Alm-Carlsson G 2013 Specification of absorbed dose to water using model-based dose calculation algorithms for treatment planning in brachytherapy *Phys. Med. Biol.* **58** 2561–79
- Carlsson-Tedgren A and Ahnesjö A 2008 Optimization of the computational efficiency of a 3D, collapsed cone dose calculation algorithm for brachytherapy *Med. Phys.* **35** 1611
- Cullen D E, Hubbell J H and Kissel L 1997 *EPDL97: the Evaluated Photon Data Library* (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory)
- Dolan J, Li Z and Williamson J F 2006 Monte Carlo and experimental dosimetry of an ^{125}I brachytherapy seed *Med. Phys.* **33** 4675–4684
- Fonseca G P *et al* 2015 Dose specification for ^{192}Ir high dose rate brachytherapy in terms of dose-to-water-in-medium and dose-to-medium-in-medium *Phys. Med. Biol.* **60** 4565–79
- Granero D *et al* 2011 Dosimetry revisited for the HDR ^{192}Ir brachytherapy source model mHDR-v2 *Med. Phys.* **38** 487–94
- ICRP 2009 Adult reference computational phantoms ICRP Publication 110 *Ann. ICRP* **39** 2
- ICRU 1992 *Photon, Electron, Proton and Neutron Interaction Data for Body Tissues (ICRU Report vol 46)* (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements)
- ICRU 2016 *Key Data for Ionizing Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications (ICRU Report vol 90)* (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements)
- Kumar S, Deshpande D D and Nahum A E 2016 Dosimetric response of variable-size cavities in photon-irradiated media and the behaviour of the Spencer–Attix cavity integral with increasing Δ *Phys. Med. Biol.* **61** 2680–704
- Landry G *et al* 2011 The difference of scoring dose to water or tissues in Monte Carlo dose calculations for low energy brachytherapy photon sources *Med. Phys.* **38** 1526–33
- Lloyd S A M and Ansbacher W 2013 Evaluation of an analytic linear Boltzmann transport equation solver for high-density inhomogeneities *Med. Phys.* **40** 11707

- Nath R *et al* 1995 Dosimetry of interstitial brachytherapy sources: recommendations of the AAPM radiation therapy committee task group no 43 *Med. Phys.* **22** 209–34
- Perez-Calatayud J *et al* 2012 Dose calculation for photon-emitting brachytherapy sources with average energy higher than 50 keV: report of the AAPM and ESTRO *Med. Phys.* **39** 2904–29
- Perkins S T, Cullen D E and Seltzer S M 2001 *Tables and Graphs of Electron-Interaction Cross-Sections from 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library Z = 1–100* (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory)
- Petrokokkinos L *et al* 2011 Dosimetric accuracy of a deterministic radiation transport based ^{192}Ir brachytherapy treatment planning system. Part II: Monte Carlo and experimental verification of a multiple source dwell position plan employing a shielded applicator *Med. Phys.* **38** 1981–92
- Ribberfors R 1975 Relationship of the relativistic Compton cross section to the momentum distribution of bound electron states *Phys. Rev. B* **12** 2067–74
- Rivard M J 2007 Brachytherapy dosimetry parameters calculated for a ^{131}Cs source *Med. Phys.* **34** 754–62
- Rivard M J *et al* 2006 Calculated and measured brachytherapy dosimetry parameters in water for the Xofigo X-ray source: an electronic brachytherapy source *Med. Phys.* **33** 4020–32
- Rivard M J *et al* 2004 Update of AAPM task group no. 43 report: a revised AAPM protocol for brachytherapy dose calculations *Med. Phys.* **31** 633–74
- Rivard M J, Beaulieu L and Mourtada F 2010 Enhancements to commissioning techniques and quality assurance of brachytherapy treatment planning systems that use model-based dose calculation algorithms *Med. Phys.* **37** 2645–58
- Sabbatucci L and Salvat F 2016 Theory and calculation of the atomic photoeffect *Radiat. Phys. Chem.* **121** 122–140
- Salvat F 2014 *PENELOPE. A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport* (Issy-Les-Moulineaux: OECD Nuclear Energy Agency)
- Scofield J H 1978 K- and L-shell ionization of atoms by relativistic electrons *Phys. Rev. A* **18** 963–70
- Sempau J *et al* 2003 Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE *Nucl. Instrum. Methods B* **207** 107–123
- Sempau J, Badal A and Brualla L 2011 A PENELOPE based system for the automated Monte Carlo simulation of linacs and voxelized geometries, application to far from axis fields *Med. Phys.* **38** 5887
- Sowards K T 2007 Monte Carlo dosimetric characterization of the IsoAid ADVANTAGE ^{103}Pd brachytherapy source *J. Appl. Clin. Med. Phys.* **8** 18–25
- Sutherland J G H *et al* 2012 Model-based dose calculations for ^{125}I lung brachytherapy *Med. Phys.* **39** 4365
- Van Veelen B, Ma Y and Beaulieu L 2014 ACE advanced collapsed cone engine ELEKTA White paper available at www.elekta.com

2 Correction factors for ionization chamber measurements with the “Valencia” and “large field Valencia” brachytherapy applicators

2.1 Introducció i motivació

La braquiteràpia és una tècnica àmpliament emprada per a tractar lesions menudes de pell per mitjà d'aplicadors [124]. A aquest tipus de tractament, les llavors s'introdueixen en aplicadors que, al seu torn, es situen sobre la zona afectada per irradiar-la. La funció principal dels aplicadors és la de col·limar la radiació produïda per les llavors per a que la deposició de dosi es produïska en una zona reduïda i localitzada, protegint així els teixits contigus. A més, poden emprar-se filtres per tal d'aconseguir una deposició uniforme de la dosi, modificar l'amplada del feix, etc. Dos d'aquests tipus d'aplicadors, disponibles i emprats a la pràctica clínica, són, el “Leipzig” [125] [126] i el “Valencia” (VA) [127] fabricat per *Elekta Brachytherapy* (Veenendaal, Països Baixos), els dissenys dels quals han servit com a base per al desenvolupament de nous aplicadors, anomenats “large field Valencia” (LFVA) [128], fabricat per *Elekta Brachytherapy*. i el “Bebig Valencia-type” [129], fabricat per “Eckert & Ziegler Bebig” (Berlín, Alemanya). Entre ells, el VA i el LFVA seran en els que es centre aquest estudi.

L'objectiu del desenvolupament del nou LFVA, és aconseguir irradiar una zona més ampla que l'antic VA [128], el qual està limitat a lesions de fins a 3 cm de diàmetre [130] [124]. A més, el LFVA es pot combinar amb diferents tipus de col·limadors: Circular amb 4 cm de diàmetre, circular amb 5 cm de diàmetre i el·líptic amb eixos de 3 cm x 5 cm.

Per tal de dur a terme els tractaments amb aquest tipus d'aplicadors, és necessari conèixer la distribució de dosi en profunditat produïda pel conjunt de l'aplicador, el tipus de llavor emprada i el col·limador. No obstant, tal i com s'ha discutit a la secció 2.4, no es poden obtindre mesures precises amb les cambres d'ionització sense determinar els factors correctors adients, els quals corregeixen la pertorbació que ocasiona la pròpia cambra al camp de radiació que arriba al fantoma d'aigua.

Per obtindre les distribucions de dosi, seguint les recomanacions del TRS 398, s'ha optat per emprar una cambra d'ionització pla-paral·lela, específicament el model PTW34013. Aquesta, junt als models PTW23342 i PTW23344, forma part del grup de cambres d'ionització de raig-x febles produïdes per PTW (Freiburg, Alemanya). La PTW34013 consta d'un volum sensible molt menut (0.0053 cm^3) i una membrana d'entrada fina (0.03 mm), el que la fa adequada per a dosimetria de braquiteràpia en pell, on els camps produïts pels feixos de fotons són menuts i els gradients de fluència de l'ordre del $10\% \text{ mm}^{-1}$.

2.2 Objectius

L'objectiu d'aquest treball consisteix en avaluar els factors correctors per-torbatius, i el desplaçament del punt efectiu de mesura, per a la cambra d'ionització pla-paral·lela PTW34013. Aquests factors són necessaris per a calcular els valors dosimètrics dels aplicadors VA i LFVA en l'ús clínic. A més, donat que l'aplicador LFVA no es trobava comercialment disponible en el moment de publicació de l'article, aquest treball contribueix també al desenvolupament de les seues propietats dosimètriques.

2.3 Materials i mètodes

Per acomplir els objectius, s'han efectuat una sèrie de simulacions Monte Carlo amb la llibreria PENELOPE (secció 3.1) versió 2014 i el codi penEasy (secció 3.5). Els detalls de les simulacions, junt a la metodologia per obtenir els resultats, es descriuran a continuació.

2.3.1 Descripció de les simulacions

La font emprada en l'estudi és la mHDR-v2, la geometria de la qual ve detallada a [131]. La llavor consta d'una font d' ^{192}Ir , l'espectre de fotons de la qual s'ha obtingut de la base de dades NuDat (*Brookhaven National Laboratory*), amb una mitjana de 2.29922 fotons emesos per desintegració. D'altra banda, els electrons produïts per decaïment β , conversió interna i electrons Auger no s'han considerat a la simulació, ja que la seua contribució total a la dosi és menor que el 0.1% a distàncies majors de 0.15 cm des del centre de la font [132].

Els aplicadors VA i LFVA s'han modelat a partir de les descripcions de [127] i [128] respectivament, l'esquema dels quals es pot trobar a la Figura 1 de l'article.

Finalment, respecte a la cambra d'ionització, els detalls com les composicions dels materials, les densitats i la geometria del model PTW34013, han sigut proporcionats pel fabricant, el que ha permès que es modele de forma precisa per a la simulació.

Passant a la configuració del sistema, els aplicadors s'han situat a la superfície d'un fantoma d'aigua cúbic de $40 \times 40 \times 40 \text{ cm}^3$ envoltat d'aire sec. La profunditat z es defineix respecte a la superfície del fantoma, on es situa l'origen de coordenades.

A estudis previs, s'ha comprovat que la distribució de dosi en profunditat d'ambdós aplicadors, VA i LFVA, a l'eix central no depèn del col·limador emprat [127] [128]. Per aquest motiu, únicament s'estudiarà el cas dels col·limadors amb diàmetres de 3 cm (VA) i 5 cm (LFVA).

Respecte als paràmetres elegits, les simulacions s'han configurat per obtenir les quantitats que descrivim a continuació amb una incertesa es-

tadística menor del 0.1%. En primer lloc, per caracteritzar els aplicadors, s'ha mesurat l'espectre energètic de fotons que arriben a la superfície del fantoma amb energies entre 1 keV i 1200 keV, amb un histograma amb una amplada dels segments de $\Delta E = 1$ keV. Tot seguit, s'han mesurat les distribucions energètiques de fluència energètica per tal d'obtenir els quocients $(\overline{\mu_{en}/\rho})_{w,g}$ a partir de la relació de l'equació I.4. Aquest càlcul s'ha efectuat per a diferents profunditats d'interès per tal d'obtenir la dependència del quocient amb z , el que és necessari per a les conversions de les equacions I.15 i I.17. Per recollir dita fluència energètica, s'han emprat vòxels cilíndrics amb un radi de 0.2 cm i 0.034 cm d'altura, simulant el volum actiu de la cambra. Com abans, la distribució s'ha recollit a un histograma emprant segments de $\Delta E = 1$ keV en l'interval [1, 1200] keV.

Donat que es necessita també les mesures de dosi absorbida per obtenir els factors pertorbatius, s'ha obtingut la distribució de deposició d'energia en profunditat a l'interior del fantoma d'aigua sense cambra d'ionització, emprant com a volum sensible el mateix cilindre de radi 0.2 cm i altura 0.034 cm. Com que en aquest cas no es simula cambra d'ionització, a les profunditats que s'estan tractant s'acompleix la condició d'EPC. A més, tenint en compte que, per les energies involucrades, les pèrdues radiatives en aigua representen menys del 0.07% [7], s'ha optat per deshabilitar el transport d'electrons i positrons per aquest càlcul, accelerant així la simulació sense afectar significativament a la precisió del resultat. En referència a l'energia d'absorció dels fotons, s'ha fixat a 1 keV.

A més de la deposició de dosi en el fantoma d'aigua, es necessita calcular la dosi absorbida en el volum actiu de la cambra d'ionització posicionada a diferents profunditats. Aquesta deposició de dosi, s'assigna al punt efectiu (P_{eff}) recomanat pel fabricant, és a dir, al centre de la part interna de la paret frontal del volum actiu. Per tant, s'assumeix un $\Delta P_{eff} = 0$. Per tal d'arribar a un compromís entre velocitat i precisió, s'ha dividit l'aigua que rodeja la cambra en dues parts. En primer lloc, s'ha definit una regió interna que es simularà amb una precisió major. Aquesta, conté la cambra i un cilindre que la rodeja deixant un marge de 0.05 cm. El marge elegit correspon al rang de frenat continu (R_{CSDA}) en aigua per a electrons secundaris que, al seu torn, produeixen fotons amb una contribució a la incertesa menor que 0.1% al pitjor dels casos. Respecte a les energies d'absorció, s'han fixat, per a tots els materials de la cambra i el cilindre d'aigua, a 1 keV, tant per a fotons, com electrons i positrons. Aquests llimars asseguren que totes les partícules poden arribar al volum actiu de la cambra. Finalment, donat que la cambra conté parts molt fines i es necessita una incertesa molt baixa en les mesures, s'ha optat per simular el transport d'electrons i positrons de forma detallada, és a dir, sense agrupació d'interaccions febles. D'altra banda, s'ha definit una regió externa que s'estén fins els límits del fantoma. A aquesta, l'energia d'absorció dels electrons

i positrons s'ha fixat a 200 keV, donat que la contribució de la radiació produïda pels electrons a aquesta energia representa menys d'un 0.1% i el rang en aigua és de $R_{CSDA} = 0.045$ cm.

2.3.2 Metodologia

La metodologia emprada per a determinar els factors pertorbatius correctors necessaris per a corregir les mesures de la cambra d'ionització, és la descrita a la secció 2.4. En esta, es defineixen dos mètodes, en funció de si es calcula explícitament el desplaçament del punt efectiu de mesura o es deixa com un factor corrector. A aquest treball, es compararan ambdós mètodes, sent el Mètode *I* el corresponent a l'equació I.15, on no es calcula un desplaçament explícit del punt efectiu de mesura, i el Mètode *II* el corresponent a l'equació I.17, on es calcula ΔP_{eff} a partir de la minimització del χ^2 corresponent.

El procediment a seguir es descriu a continuació. En primer lloc, es calcula la distribució de dosi en profunditat en aigua $D_w(z)$ per a l'espectre d' ^{192}I simulat amb l'aplicador. Tot seguit, es mesura la mitjana de la dosi absorbida a l'interior del volum actiu de la cambra d'ionització, situant el seu punt efectiu recomanat (P_{eff}) a distintes profunditats $\bar{D}_{air}(z)$. Com s'ha explicat, els quocients dels coeficients d'absorció màssics mitjans $(\mu_{en}/\rho)_{w,air}$ s'han calculat a partir de les distribucions de fluència energètica dels fotons, mesurades a les posicions on s'ha col·locat la cambra d'ionització. A partir d'aquestes dades, per a obtindre el factor corrector pertorbatiu global del Mètode *I*, s'empra l'expressió,

$$p_{ch} = \frac{D_w(z)}{\bar{D}_{air}(z) \left(\mu_{en}/\rho\right)_{w,air}} \quad (\text{II.3})$$

D'altra banda, per al Mètode *II*, ΔP_{eff} s'ha obtingut amb un procés iteratiu, amb el qual es pretén que el valor del quocient $D_w(z + \Delta P_{eff})/\bar{D}_{air}(z)$ siga tan independent de la profunditat com siga possible. Com s'ha vist a la secció 2.4, açò s'aconsegueix minimitzant la distribució $\chi^2 = \sum_{i=1}^N (f_i - p)^2/\Delta f_i^2$, on N és el nombre de posicions de la cambra,

$$f_i = \frac{D_w(z_i + \Delta P_{eff})}{\bar{D}_{air}(z_i) \left(\mu_{en}/\rho\right)_{w,air}} \quad (\text{II.4})$$

i Δf_i és la incertesa estadística d' f_i .

2.4 Resultats

Els resultats mostrats a la figura 4 de l'article del present treball, mostren diferències entre la dosi mesurada en aigua i la dosi mesurada per la cambra

d'ionització al P_{eff} recomanat de fins un 8% per a l'aplicador VA i un 4% per a l'aplicador LFVA, el que demostra la importància d'incorporar les correccions adients a aquest tipus de mesures.

Pel que fa al Mètode *II*, l'ajust de la distribució de χ^2 mostra que per al LFVA, la distribució és pràcticament plana a la finestra d'entrada de la cambra ($\Delta P_{eff} = 0$) i s'incrementa a partir de valors de $\Delta P_{eff} \approx -0.02$ cm, pel que l'anàlisi coincideix amb el P_{eff} recomanat. En canvi, per a l'aplicador VA aquest mètode proporciona un punt efectiu de mesura pròxim a la part inferior del volum actiu ($\Delta P_{eff} = 0.057$ cm). Un estudi dels residus (figura 6 de l'article) mostra que per ambdós aplicadors les correccions proporcionen valors consistents per a totes les profunditats mesurades, i dins de la incertesa objectiu.

D'altra banda, el Mètode *I* proporciona resultats compatibles amb el Mètode *II* per a l'aplicador LFVA, però no per al VA. En aquest últim, el Mètode *I* proporciona valors amb discrepàncies dins del rang de $[-0.8\%, +1.1\%]$. Tot i que representa una millora substancial respecte al 8% de la mesura sense correcció, aquests valors continuen sent alts per a l'ús en clínica. Per aquest motiu, i per tal de poder mantindre el punt efectiu de mesura recomanat pel fabricant, s'ha emprat una variant del Mètode *I* a la que s'anomena Mètode *Ib*. La variant consisteix en emprar un factor corrector pertorbatiu global depenent de la profunditat. Aquesta solució és viable per a l'ús clínic degut a que les profunditats rellevants per a l'aplicador VA estan per sota d'1 cm. Per simplicitat, s'ha optat per emprar una dependència lineal del coeficient amb z , el que, com es mostra, és suficient per a obtenir incerteses estadístiques dins del rang objectiu.

Els valors obtinguts als diferents mètodes es recullen a la taula II.2 junt als quocients dels coeficients d'absorció massics, els quals s'ha comprovat que són independents de la profunditat dins de la incertesa estadística objectiu (0.1%).

	Aplicador	VA	LFVA
Mètode <i>I</i>	factor corrector global p_c	0.976	0.943
	ΔP_{eff} (cm)	—	—
Mètode <i>Ib</i>	factor corrector global $p_c(z)$ (cm)	$0.986 - 0.023z$	0.943
	ΔP_{eff} (cm)	—	—
Mètode <i>II</i>	factor corrector parcial p'_c	0.922	0.943
	ΔP_{eff} (cm)	0.057	0.0
	$\left(\overline{\mu_{en}/\rho}\right)_{w,air}$	1.104	1.109

Taula II.2: Factors correctors pertorbatius i desplaçament del punt efectiu de mesura obtinguts per als diferents mètodes emprats al present treball. S'inclou també el quocient dels coeficients d'absorció massics per a ambdós aplicadors.

2.5 Article



PAPER

Correction factors for ionization chamber measurements with the ‘Valencia’ and ‘large field Valencia’ brachytherapy applicators

RECEIVED
28 February 2018REVISED
12 April 2018ACCEPTED FOR PUBLICATION
4 May 2018PUBLISHED
8 June 2018V Gimenez-Alventosa¹, V Gimenez^{2,3}, F Ballester⁴, J Vijande^{3,4} and P Andreo⁵¹ Instituto de Instrumentación para Imagen Molecular (I3M), Centro Mixto CSIC—Universitat Politècnica de València, 46022 Valencia, Spain² Department of Theoretical Physics, University of Valencia, 46100 Burjassot, Spain³ Instituto de Física Corpuscular, IFIC (UV-CSIC), 46100 Burjassot, Spain⁴ Unidad Mixta de Investigación en Radiofísica e Instrumentación Nuclear en Medicina (IRIMED), Instituto de Investigación Sanitaria La Fe (IIS-La Fe)—Universitat de Valencia (UV), Valencia, Spain⁵ Department of Medical Radiation Physics and Nuclear Medicine, Karolinska University Hospital, SE-171 76 Stockholm, SwedenE-mail: Javier.vijande@uv.es**Keywords:** skin applicator, Valencia applicator, large field Valencia applicator, HDR brachytherapy, brachytherapy dosimetry, Monte Carlo**Abstract**

Treatment of small skin lesions using HDR brachytherapy applicators is a widely used technique. The shielded applicators currently available in clinical practice are based on a tungsten-alloy cup that collimates the source-emitted radiation into a small region, hence protecting nearby tissues. The goal of this manuscript is to evaluate the correction factors required for dose measurements with a plane-parallel ionization chamber typically used in clinical brachytherapy for the ‘Valencia’ and ‘large field Valencia’ shielded applicators. Monte Carlo simulations have been performed using the PENELOPE-2014 system to determine the absorbed dose deposited in a water phantom and in the chamber active volume with a Type A uncertainty of the order of 0.1%. The average energies of the photon spectra arriving at the surface of the water phantom differ by approximately 10%, being 384 keV for the ‘Valencia’ and 343 keV for the ‘large field Valencia’. The ionization chamber correction factors have been obtained for both applicators using three methods, their values depending on the applicator being considered. Using a depth-independent global chamber perturbation correction factor and no shift of the effective point of measurement yields depth-dose differences of up to 1% for the ‘Valencia’ applicator. Calculations using a depth-dependent global perturbation factor, or a shift of the effective point of measurement combined with a constant partial perturbation factor, result in differences of about 0.1% for both applicators. The results emphasize the relevance of carrying out detailed Monte Carlo studies for each shielded brachytherapy applicator and ionization chamber.

1. Introduction

Treatment of small skin lesions using brachytherapy applicators is a widely used technique—see e.g. Ouhib *et al* (2015) and references therein. Shielded applicators currently available in clinical practice, such as the ‘Leipzig’ (Niu *et al* 2004, Perez-Calatayud *et al* 2005) and the ‘Valencia’ (VA) (Granero *et al* 2008) by Elekta Brachytherapy (Veenendaal, The Netherlands), are based on a tungsten-alloy cup that collimates the source-emitted radiation into a small region, hence protecting nearby tissues. Based on this type of design, two new applicators have been proposed recently. These are the ‘large field Valencia’ applicator (LFVA) (Candela-Juan *et al* 2016) by Elekta Brachytherapy, and the ‘Bebig Valencia-type’ applicator (Anagnostopoulos *et al* 2017) by Eckert & Ziegler Bebig (Berlin, Germany).

The VA applicator allows treating superficial skin lesions using a high-dose-rate ¹⁹²Ir source together with the brachytherapy remote afterloaders microSelectron or Flexitron (Elekta Brachytherapy). Depending on the required treatment, two VA field diameters of 2 cm (model VH2) and 3 cm (model VH3) are available. In order to obtain a homogeneous flat dose distribution at the typical prescription depth of 3 mm (Perez-Calatayud *et al*

2005, Ouhib *et al* 2015) a flattening filter is added at the exit side of the applicator. The filter produces flat dose rate distributions with a small penumbra, which allows a conformal dose delivery to the 3 mm prescription depth to the target while minimizing the dose to healthy tissues.

While the current VA applicator only allows treating lesions with planning target volumes up to diameters of 3 cm (Tormo *et al* 2014, Ouhib *et al* 2015), the LFVA applicator has been developed in an attempt to overcome this limitation (Candela-Juan *et al* 2016). The applicator does not incorporate a flattening filter to create a homogeneous dose distribution as that in the VA applicator. Instead, it has three catheters: two of these form a circumference of 2.3 cm radius, and the third has a single dwell position at the centre of the circumference. The LFVA applicator can be used with both microSelectron or Flexitron afterloaders. The LFVA is made of a tungsten alloy to reduce most of the peripheral dose to healthy tissues and incorporates various interchangeable collimators: (i) a circular collimator of 4 cm diameter, (ii) a circular collimator of 5 cm diameter and (iii) an elliptical collimator of 3 cm \times 5 cm axes. In addition, a plastic cap is attached at the exit surface of both applicators to remove any electron contamination and flatten the entrance surface (Granero *et al* 2016).

For shielded applicators of these types, measurements of depth-dose distributions in water are usually performed using plane-parallel ionization chambers. Such measurements strictly require taking into account correction factors for the perturbation of the radiation field due to the presence of the chamber in the water phantom, which may involve considering the effective point of measurement of the ionization chamber. The plane-parallel chamber selected for this work is the PTW34013. This chamber, together with the PTW23342 and PTW23344, belongs to the group of soft x-ray ionization chambers produced by PTW (Freiburg, Germany). The PTW34013 chamber has a very small sensitive volume (0.0053 cm³) and a thin entrance membrane (0.03 mm). This allows measuring therapeutic photon beams with very small field sizes and/or steep fluence gradients, making this chamber well suited for skin-brachytherapy dosimetry where the expected gradient is of the order of 10% mm⁻¹. According to the manufacturer (PTW 2017), the group of soft x-ray chambers have a flat energy response up to 100 keV; it has also been reported in the literature that they are comparable to other ionization chambers for depth-dose measurements in the energy range of the order of 40–300 keV (Hill *et al* 2014, and references therein). They have also been used reliably at megavoltage energies for analysing beam properties and the stability of a flattening-filter-free 7 MV photon beam (Dzierma *et al* 2012). The VA and LFVA photon spectra exiting the applicator extend beyond the flat energy-response range indicated by the manufacturer for these chambers, and therefore the possible energy dependence of the required correction factors has to be addressed.

The goal of this study is to evaluate the perturbation correction factors, including the determination of the effective point of measurement, for the PTW34013 plane-parallel ionization chamber for its use in clinical brachytherapy dosimetry using the VA (Granero *et al* 2008) and the LFVA (Candela-Juan *et al* 2016) applicators. Note that since the LFVA is not yet commercially available, this manuscript contributes to developing its dosimetry properties. To do so, section 2 presents the details of the Monte Carlo study performed, along with the formalism used to derive perturbation correction factors and the effective point of measurement. Results and discussions are included in section 3, and the findings of the work are summarized in section 4.

2. Materials and methods

2.1. Photon energy spectra, energy-fluence and depth-dose curves: Monte Carlo study

The Monte Carlo (MC) system used been PENELOPE version 2014 (PEN14) (Sempau *et al* 1997, 2003, Salvat 2015), which simulates the transport of photons and electrons in any arbitrary material for energies in the range of interest for medical physics. This MC system, henceforth referred to as PEN14, has been extensively applied in the field of brachytherapy (Ballester *et al* 2015, Ma *et al* 2017). PEN14 photon cross-sections for Rayleigh scattering are extracted from the EPDL97 cross sections library (Perkins *et al* 1991, Cullen *et al* 1997). For incoherent scattering, PEN14 uses the Relativistic Impulse Approximation together with binding effects and Doppler broadening, i.e. for a given scattering angle, the cross section yields a photon energy distribution rather than the single photon energy resulting from the scattering of a photon with a free electron (Ribberfors 1975). Photoelectric cross-sections are from the database of Sabbatucci and Salvat (2016), which uses the same theory as in the re-normalized calculations by Scofield (1978), but implements more accurate numerical algorithms and an extended energy range. A comparison of mass energy-absorption coefficients for different materials using this photon dataset and values from other libraries has been described by Andreo *et al* (2012). Electron cross-sections are directly calculated by PEN14. In this work, all material compositions and mass densities were those recommended by ICRU Report 37 (ICRU 1984) with the exception of the updated mean excitation energies and mass density for water and carbon (Andreo *et al* 2013, ICRU 2016).

The mHDR-v2 source model was used in the study; its detailed geometry was adopted from Granero *et al* (2011). The VA and LFVA applicators were modelled according to the descriptions by Granero *et al* (2008) and Candela-Juan *et al* (2016), respectively, using the specifications provided by the manufacturer. A schematic drawing of both applicators is shown in figure 1.

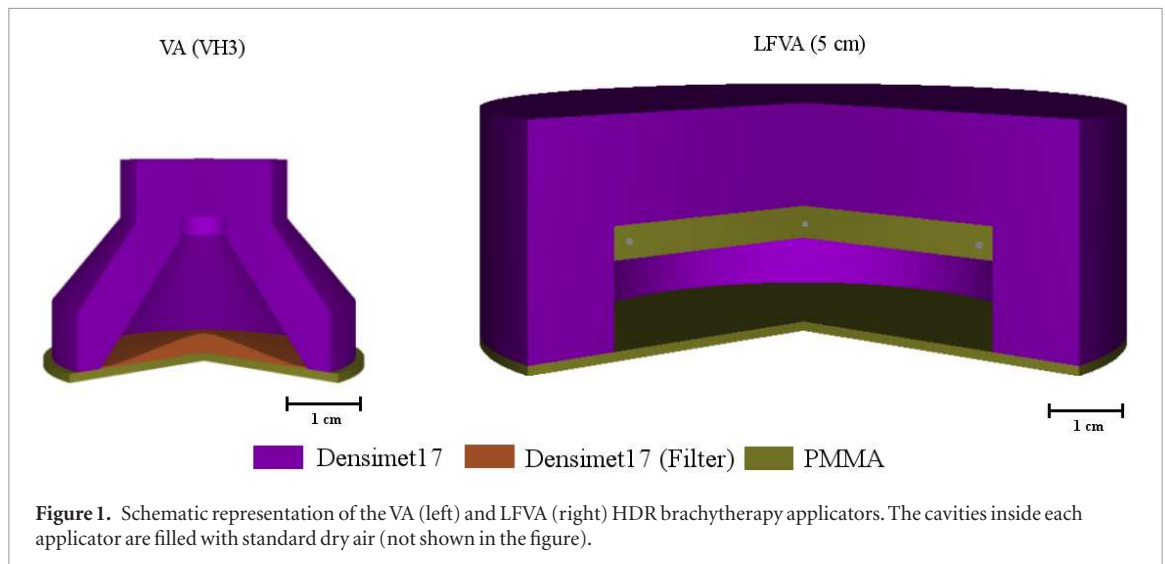


Figure 1. Schematic representation of the VA (left) and LFVA (right) HDR brachytherapy applicators. The cavities inside each applicator are filled with standard dry air (not shown in the figure).

The ^{192}Ir photon spectrum was taken from the NuDat database (Brookhaven National Laboratory 2013). The electron spectrum includes β decay, internal conversion electrons (IC) and Auger electrons that were not considered in the simulations since their effect on the total dose is known to be less than 0.1% at distances greater than 0.15 cm from the source centre (Ballester *et al* 2009). On average, in each disintegration 2.299 22 photons $\text{Bq}^{-1} \text{s}^{-1}$ are emitted.

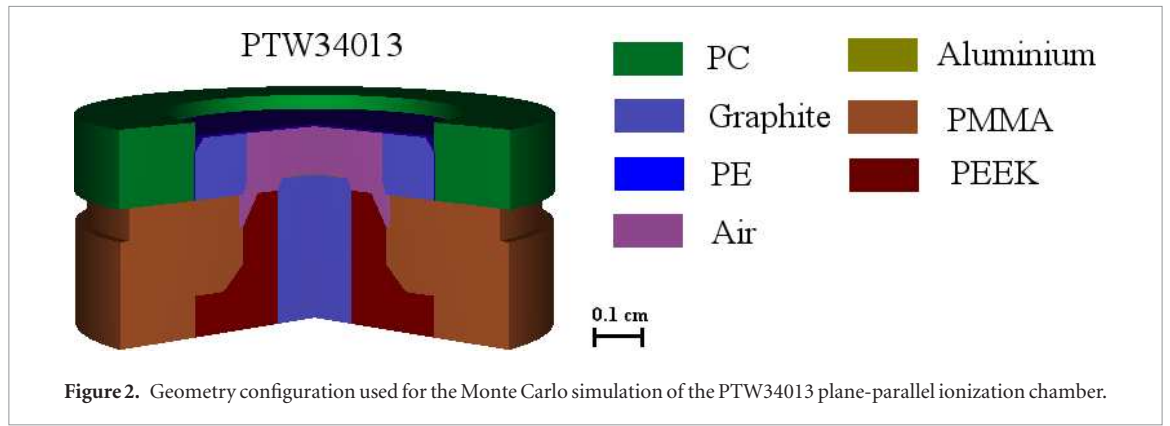
Blueprints, composition by weight and densities of the chamber materials provided by the manufacturer allowed us to model accurately the geometry details of the PTW34013 chamber; the configuration used for the MC simulations is shown in figure 2. The effective point of measurement for this chamber, P_{eff} , is recommended to be at the centre of the inner side of the front wall (PTW 2017), in consistency with IAEA TRS-381 (Almond *et al* 1997).

For the MC simulation, the applicators were located at the surface of a cubic $40 \times 40 \times 40 \text{ cm}^3$ water phantom surrounded by dry air. The depth z is defined with respect to the phantom surface, where the origin of coordinates is located.

It has been shown, for both the VA and LFVA applicators, that the depth dose along the central axis does not depend on the collimator used (Granero *et al* 2008, Candela-Juan *et al* 2016). Therefore, only the cases of 3 cm (VA) and 5 cm (LFVA) collimator diameters have been analysed in the present study.

The goal of the MC simulations is to compute quantities with 0.1% Type A uncertainty, and all the simulation parameters have been tailored to achieve such goal. Four different types of simulation have been done for each applicator to obtain the following quantities:

- (i) Photon spectra arriving at the surface of the water phantom. This was scored at the phantom surface between 1 keV and 1200 keV with a $\Delta E = 1 \text{ keV}$ energy grid.
- (ii) Photon energy-fluence distributions, differential in energy, as a function of depth. Cylindrical voxels of 0.2 cm radius and 0.034 cm height were used as scoring regions on the central axis to mimic the chamber active volume. The distributions were scored in water, between 1 keV and 1200 keV with a $\Delta E = 1 \text{ keV}$ energy grid.
- (iii) Depth-dose distributions in the water phantom in the absence of the ionization chamber. The same cylindrical voxels as in (ii) were used. An energy transport cut-off of 1 keV was chosen for photons. Since, for the energy range involved, radiative losses in water are less than 0.07% (Salvat 2015), and charged-particle equilibrium exists in the phantom, an infinite energy transport cut-off was chosen for both electrons and positrons, i.e. charged particles were not tracked for the depth-dose calculations. The Type A uncertainties achieved were below 0.1% in all voxels (0.07% or lower for depths greater than 0.1 cm).
- (iv) Absorbed dose in the active volume of the ionization chamber positioned at different depths. This absorbed dose was assigned to the P_{eff} recommended for the chamber (the centre of the inner side of the front wall of the active volume), so that the shift in P_{eff} (see section 2.2), is $\Delta P_{\text{eff}} = 0$. The water surrounding the ionization chamber was divided into two regions:
 - (a) An inner region, containing the chamber and a surrounding cylinder 0.05 cm larger than the chamber dimensions. The rationale for this distance is that it corresponds to the continuous slowing-down range (R_{CSDA}) in water of secondary electrons whose yield of higher-order photons is less than the uncertainty goal of 0.1%. Therefore, all chamber materials and water inside this region were characterized by a 1 keV energy transport cut-off for photons, electrons and positrons



to ensure that all particles could arrive at the active volume. Additionally, an event-by-event simulation was chosen for the electrons and positrons in this region.

- (b) An outer region extending up to the phantom dimensions, where the electron and positron energy transport cut-off was increased to 200 keV, justified in terms of the radiation yield (0.1%) and $R_{\text{CSDA}} = 0.045$ cm in water at this energy. Hence, no electron with energy below this threshold can reach the inner region and its bremsstrahlung yield is within the uncertainty goal. Type A uncertainties were lower than 0.1% in all positions.

2.2. Determination of chamber perturbation correction factors and effective point of measurement

Various approaches can be found in the literature to the implementation of perturbation correction factors in the determination of absorbed dose to water using measurements performed with a plane-parallel ionization chamber.

The most straightforward of these, and probably less prone to error in implementation, is to assign the absorbed dose to the effective point of measurement recommended for this type of chamber (usually below the entrance foil) and to include all type of perturbation corrections in a global chamber correction factor p_{ch} (Andreo *et al* 2000). For a plane-parallel chamber, this global correction can be defined as the product of various perturbation factors, e.g. $p_{\text{ch}} = p_{\text{dis}} p_{\text{wall}} p_{\text{fl}}$, where p_{dis} accounts for the effect of replacing a volume of water with the chamber, p_{wall} accounts for the presence of non-water-equivalent materials in the chamber walls, and p_{fl} corrects for the difference in photon fluence between water and the ionization chamber air volume. In this case, the relation between the absorbed dose to water at a point in a given depth, $D_{\text{w}}(z)$, and the mean absorbed dose scored in the active volume of the ionization chamber $\bar{D}_{\text{air}}(z)$ can be written as

$$\frac{D_{\text{w}}(z)}{\bar{D}_{\text{air}}(z)} = \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho} \right)_{\text{w,air}} p_{\text{dis}} p_{\text{wall}} p_{\text{fl}} = \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho} \right)_{\text{w,air}} p_{\text{ch}} \quad (1)$$

where $\left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho} \right)_{\text{w,air}}$ is the ratio of mass energy-absorption coefficients of water and air, averaged over the photon energy-fluence at a given depth z . In what follows, this approach will be referred to as Method I.

An alternative approach is to replace the use of a p_{dis} perturbation factor, which assumes the chamber P_{eff} to be just below the entrance foil, by a P_{eff} shifted a distance ΔP_{eff} together with a partial chamber correction factor given by $p'_{\text{ch}} = p_{\text{wall}} p_{\text{fl}}$. In this case, one would have

$$\frac{D_{\text{w}}(z + \Delta P_{\text{eff}})}{\bar{D}_{\text{air}}(z)} = \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho} \right)_{\text{w,air}} p_{\text{wall}} p_{\text{fl}} = \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho} \right)_{\text{w,air}} p'_{\text{ch}}; \quad (2)$$

this will be referred to as Method II.

In both methods, the purpose is to determine the chamber perturbation correction factor (p_{ch} or p'_{ch}) and the relevant displacement of the effective point of measurement ΔP_{eff} in a given photon field. The roadmap can be described as follows:

- (i) A Type A uncertainty goal was specified. All simulations were required to conform to it.
- (ii) The depth-dose distribution in water, $D_{\text{w}}(z)$, was evaluated for the ^{192}Ir photon spectrum by means of a Monte Carlo simulation.
- (iii) The mean absorbed dose in the active volume of the ionization chamber was scored positioning the chamber with its recommended P_{eff} (inner side of the chamber front wall) at various depths, $\bar{D}_{\text{air}}(z_i)$.

- (iv) The $\left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}}$ -ratio was calculated for the photon energy-fluence at the depths where the ionization chamber was located.
- (v) The global chamber perturbation correction factor was determined from equation (1), i.e.

$$p_{\text{ch}} = \frac{D_{\text{w}}(z)}{\bar{D}_{\text{air}}(z) \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}}}. \quad (3)$$

- (vi) The shift ΔP_{eff} was obtained by iteration, modifying its value until the ratio $D_{\text{w}}(z + \Delta P_{\text{eff}})/\bar{D}_{\text{air}}(z)$ became as depth-independent as possible. This was fulfilled by minimizing the usual χ^2 distribution, defined as $\chi^2 = \sum_{i=1}^N (f_i - p)^2 / \Delta f_i^2$, where N is the number of chamber positions,

$$f_i = \frac{D_{\text{w}}(z_i + \Delta P_{\text{eff}})}{\bar{D}_{\text{air}}(z_i) \left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}}},$$

and Δf_i is the Type A uncertainty of the f_i ratios. This approach assumes that the partial chamber perturbation correction factor p'_{ch} is depth-independent. By minimizing χ^2 with respect to p , one arrives at $p = \frac{s_1}{s_0}$ and $\chi^2 = s_2 - \frac{s_1^2}{s_0}$, with $s_n = \sum_{i=1}^N f_i^n / \Delta f_i^{2n}$. The ΔP_{eff} value can then be easily obtained from a χ^2 versus ΔP_{eff} plot. Further details of the minimizing procedure can be found in Kawrakow (2006).

3. Results and discussion

3.1. Photon energy spectra, energy-fluence and depth-dose distributions

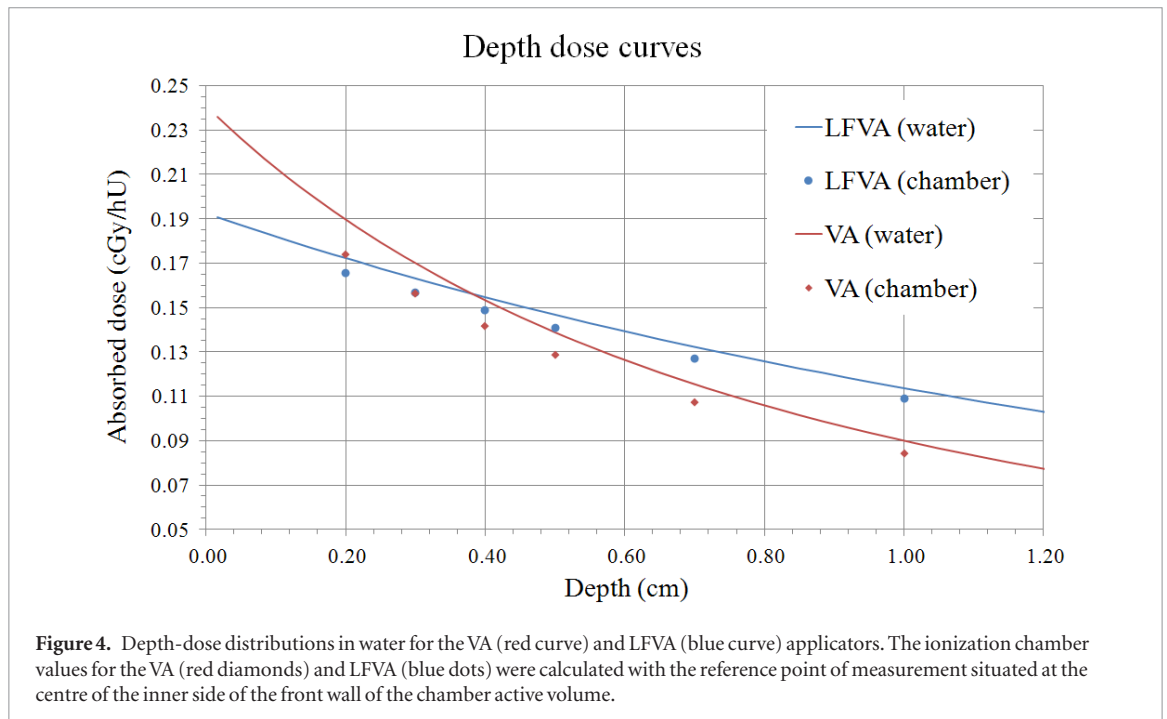
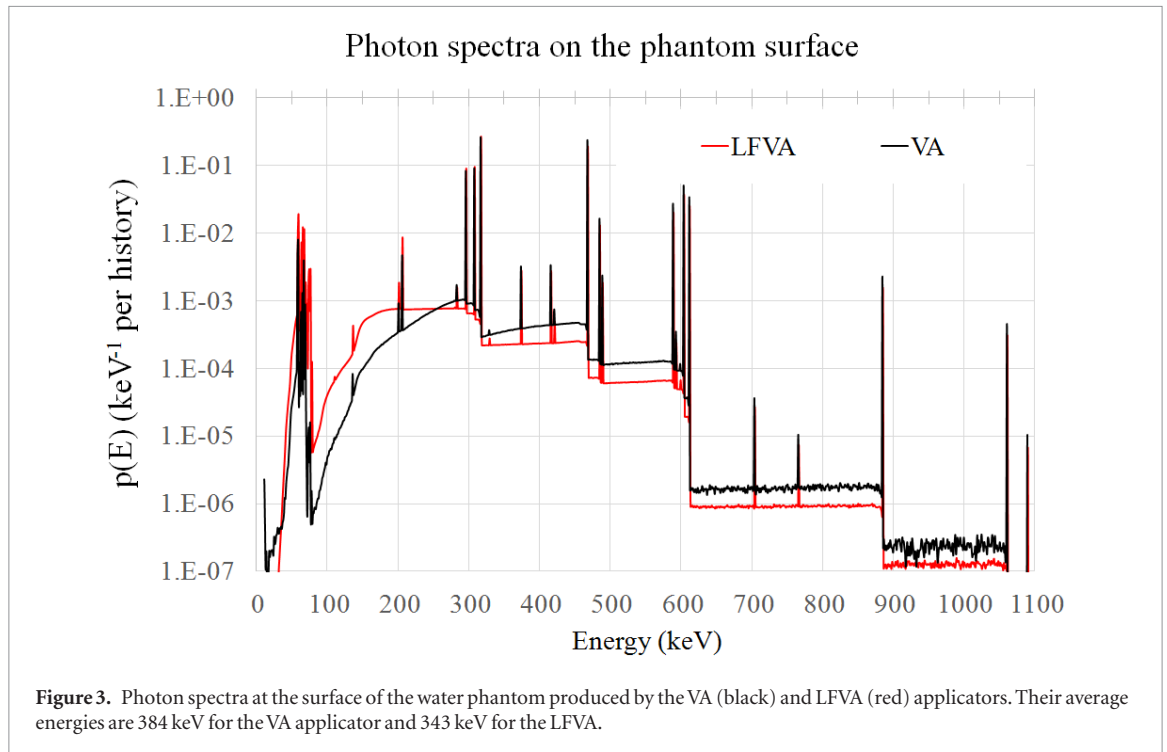
The photon spectra arriving at the surface of the water phantom for the two applicators are shown in figure 3. Their average energies differ by approximately 10%, being 384 keV for the VA applicator and 343 keV for the LFVA. The expected hardening of the VA spectrum due to the flattening filter can be clearly observed both in the average energies and in the shape of the spectrum.

Although both applicators are designed to yield flat absorbed dose distributions at the clinical prescription depth, the absorbed dose delivered by the two applicators at the prescription depth differs in value. The energy dependence and the different spatial distribution of the photons (those emitted from the VA are emitted from a single central position and then filtered, while those emitted by the LFVA are also emitted from lateral positions and unfiltered) produce different depth-dose distributions. This is shown in figure 4, where it can be observed that the VA depth-dose curve has a gradient of $10\% \text{ mm}^{-1}$, while that of the LFVA is reduced to $5\% \text{ mm}^{-1}$. In the following, it will be seen how these differences in shape and average energy impact the determination of the correction factors.

Photon energy-fluence distributions were evaluated as described in section 2 for the depths indicated by symbols in figure 4. Their values were used to obtain the $\left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}}$ -ratios as a function of depth. It was found that, although the mass energy-absorption coefficients averaged over the local photon energy-fluence depend on the depth within the required uncertainty of 0.1%, their ratios are depth independent. The values obtained were $\left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}} = 1.109 \pm 0.001$ for the VA applicator and $\left(\overline{\mu_{\text{en}}/\rho}\right)_{\text{w,air}} = 1.104 \pm 0.001$ for the LFVA.

In 2015, the American Brachytherapy Society (ABS) published a report that included a literature summary and best practices used in non-melanoma skin cancer (NMSC) (Ouhib *et al* 2015). For superficial NMSC, the ABS Report indicated a typical prescription depth of 5 mm for moulds and flaps, and of 3 mm for the shielded applicators currently available—these values being based on reported clinical practice. The reason for this difference in prescription depth has been justified in an exploratory Monte Carlo study (Granero *et al* 2017). It shows that the percentage depth dose at 3 mm depth for shielded applicators is approximately the same as that at 5 mm depth for moulds and flaps, supporting the ABS prescription depth recommendations. These treatment modalities have various average energies and spectra, ranging from the hundreds of keV in the shielded applicators to the tens of keV in the electronic brachytherapy modalities. In spite of this, no difference in clinical outcome has been reported (Ouhib *et al* 2015).

⁶A misprint in equation (5) of Kawrakow (2006) should be noted.



3.2. Determination of the effective point of measurement

The depth dose at the effective point of measurement of the ionization chamber located at different depths z differ from the corresponding depth doses in water at the same depth, as shown in figure 4. These differences are up to -8% for the VA applicator and -4% for the LFVA. Thus, the need to incorporate a correction factor and/or a displacement of the effective point of measurement becomes evident.

The formalism described in section 2 was applied to the VA and LFVA applicators, obtaining the χ^2 per degree of freedom distributions shown in figure 5. Note that for the case of the LFVA applicator (blue curve) such distribution is practically flat in the vicinity of the entrance window, i.e. $\Delta P_{\text{eff}} = 0$, starting to increase for values of $\Delta P_{\text{eff}} \approx -0.02$ cm.

The values obtained for the ionization chamber perturbation correction factors and the shift of the effective point of measurement obtained with each method are given in table 1 for the two applicators, along with the respective values of the average ratios of mass energy-absorption coefficients. Since $\Delta P_{\text{eff}} = 0$ corresponds to the position of P_{eff} recommended by both TRS-381 (Almond *et al* 1997) and the manufacturer, Methods I and II

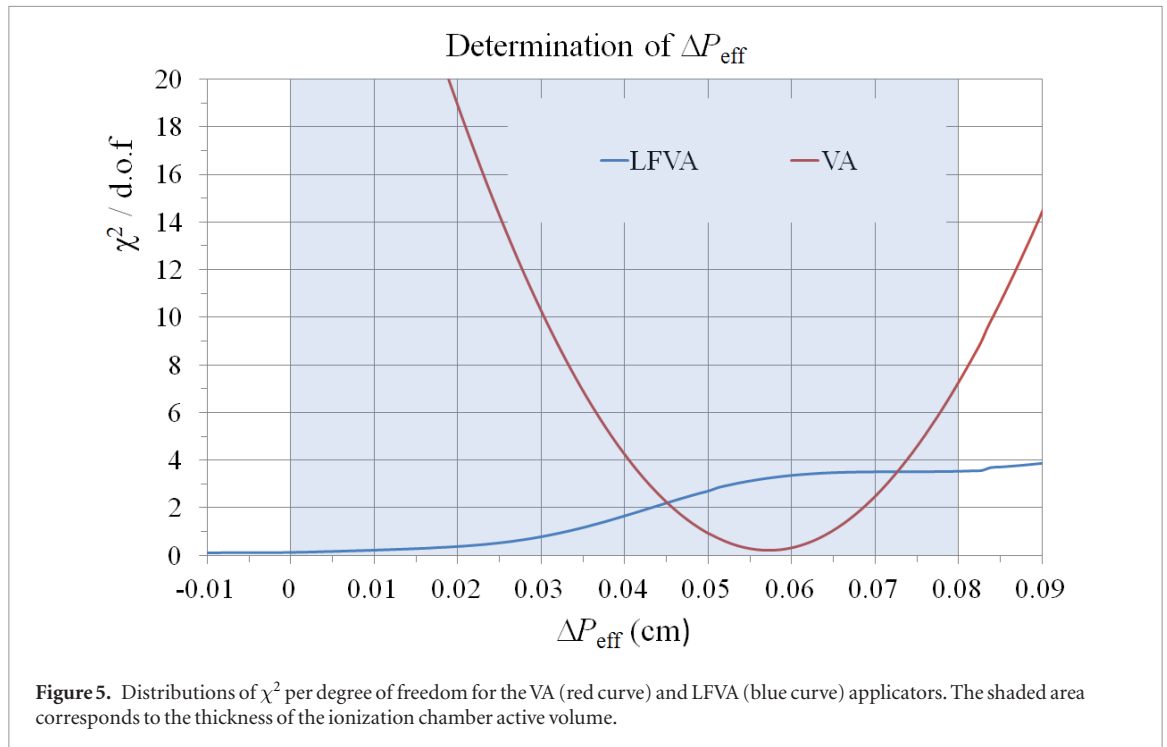


Figure 5. Distributions of χ^2 per degree of freedom for the VA (red curve) and LFVA (blue curve) applicators. The shaded area corresponds to the thickness of the ionization chamber active volume.

Table 1. Perturbation correction factors (p_{ch} and p'_{ch}) and shift of the effective point of measurement (ΔP_{eff}), relative to the centre of the inner side of the front wall, for the PTW34013 plane-parallel ionization chamber using the VA and LFVA applicators with an ^{192}Ir mHDR-v2 source. Values of the $\left(\frac{\mu_{\text{en}}}{\rho}\right)_{\text{w,air}}$ for the corresponding spectra are also given.

	Applicator	VA	LFVA
Method I	Global correction factor, p_{ch}	0.976	0.943
	Shift of the effective point of measurement, ΔP_{eff} (cm)	—	—
Method Ib	Global correction factor, p_{ch}	$p_{\text{ch}}(z)^{\text{a}}$	0.943
	Shift of the effective point of measurement, ΔP_{eff} (cm)	—	—
Method II	Partial correction factor, p'_{ch}	0.922	0.943
	Shift of the effective point of measurement, ΔP_{eff} (cm)	0.057	0.0
	$\left(\frac{\mu_{\text{en}}}{\rho}\right)_{\text{w,air}}$	1.104	1.109

^a $p_{\text{ch}}(z) = 0.986 - 0.023z$ (cm).

coincide for the LFVA applicator. This is not the case for the VA, where Method II provides an effective point of measurement located close to the bottom of the active volume.

To determine the adequacy of the calculated values, a residual analysis was performed. Ratios between the corrected ionization chamber dose and depth-dose values in water are shown in figure 6 for the LFVA (a) and VA (b)–(d) applicators.

As discussed above, for the LFVA applicator both methods agree and the corresponding residual analysis shows data consistent with the uncertainty goal of the present work. For the VA applicator, although the residuals for Method II are well within the present uncertainty goal at all depths, for Method I discrepancies are in the range $[-0.8\%, +1.1\%]$. These differences represent an improvement over the -8% observed between depth dose in water and uncorrected ionization chamber results, but they are large for clinical use.

Considering that the relevant depths for the clinical applications of the VA applicator are less than 1 cm, one possible modification while maintaining the effective point of measurement recommended by the manufacturer is to allow for a depth-dependent correction factor $p_{\text{ch}}(z)$. We term this alternative Method Ib. The simplest choice is a linear depth-dependence, the best parametrization being $p_{\text{ch}}(z) = 0.986 - 0.023z$ (with z in cm). As can be observed in figure 6(d), this modification improves the differences observed in Method I.

To conclude, figure 7 shows the ionization chamber absorbed doses compared to the absorbed dose in the water phantom at various depths for each applicator and method. These results illustrate the energy dependence of the shift of the effective point of measurement and clearly emphasize the need for detailed state-of-the-art MC simulations before using this ionization chamber with different shielded applicators.

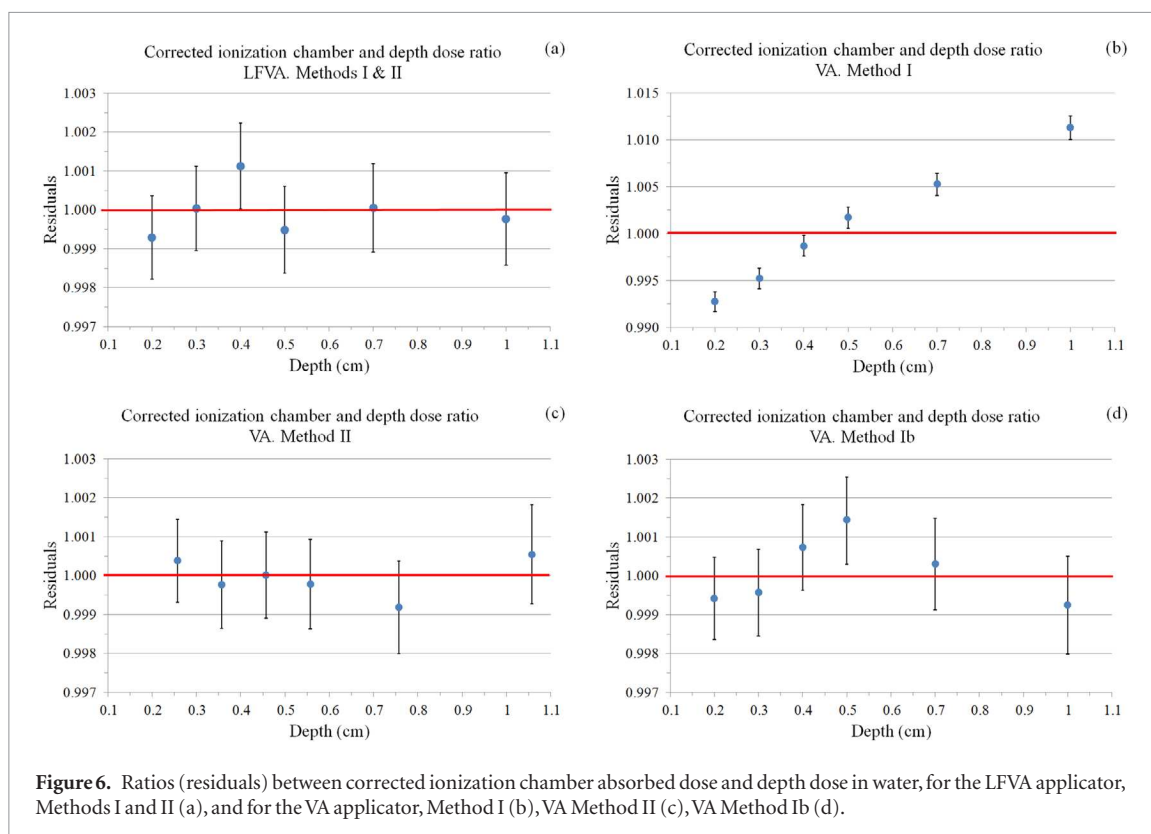


Figure 6. Ratios (residuals) between corrected ionization chamber absorbed dose and depth dose in water, for the LFVA applicator, Methods I and II (a), and for the VA applicator, Method I (b), VA Method II (c), VA Method Ib (d).

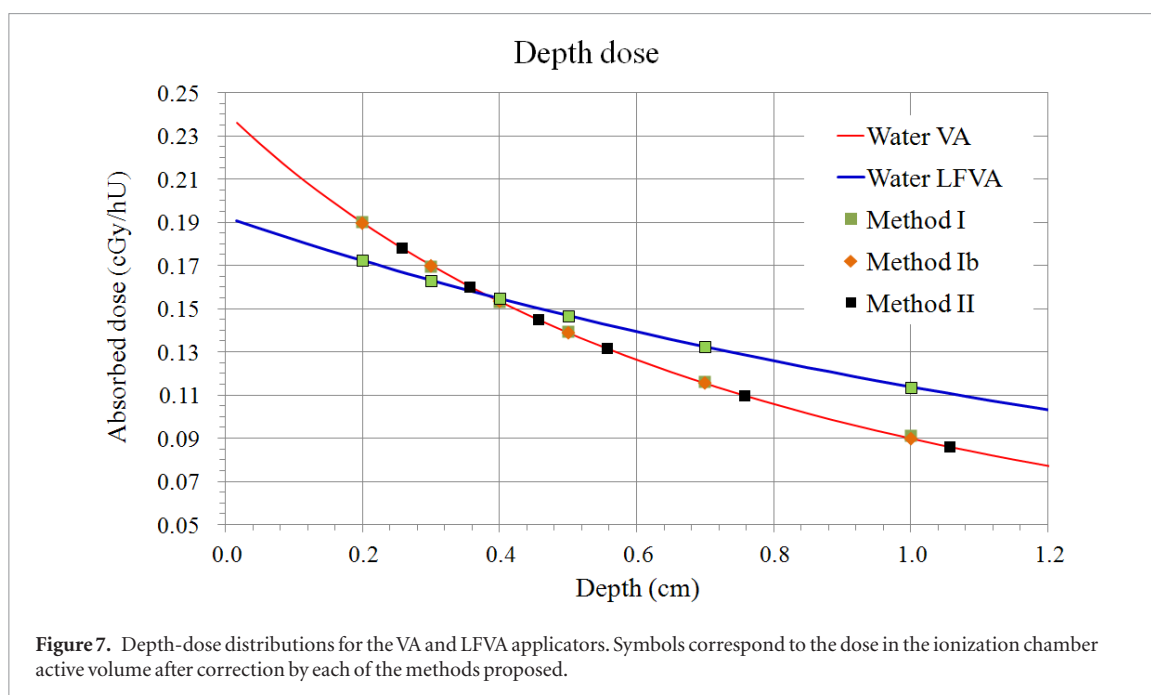


Figure 7. Depth-dose distributions for the VA and LFVA applicators. Symbols correspond to the dose in the ionization chamber active volume after correction by each of the methods proposed.

4. Conclusions

Perturbation correction factors and shifts of the effective point of measurement for a typical ionization chamber suited for absorbed dose measurements in brachytherapy for two shielded applicators, the ‘Valencia’ and the ‘large field Valencia’, have been determined. The use of three different methods has been addressed.

Method II has been found to deliver correction factors for both applicators able to correct the absorbed dose in the active volume of the chamber within 0.1%. This requires a shift of the effective point of measurement and a partial perturbation correction factor, which have been determined.

Method I, using a depth-independent global chamber perturbation correction factor and no shift of the effective point of measurement, yields differences of up to 1% for the ‘Valencia’ applicator. A modification of the method using a depth-dependent perturbation correction factor, Method Ib, enables differences of about 0.1%.

It is concluded that a clear dependence of these corrections on the applicator type and ionization chamber considered has been found, hence emphasizing the relevance of detailed Monte Carlo calculation prior to performing dose measurements using these shielded brachytherapy applicators.

Acknowledgments

The authors would like to thank PTW for kindly providing the T34013 blueprints and specifications for the purpose of this study. The authors wish to acknowledge the use of Tirant (University of Valencia), node in the Spanish Supercomputing Network, the hydrateo cluster (Theoretical Physics Department at the University of Valencia) and the IFIC computing center. FB and JV acknowledge financial support from the Universitat de València under project UV-INV-AE17-707705. VG acknowledges partial financial support from the MINECO under grants FPA2014-54459-P and FPA2017-84543-P.

ORCID iDs

F Ballester  <https://orcid.org/0000-0002-3785-8399>

J Vijande  <https://orcid.org/0000-0002-9568-8236>

References

- Almond P, Andreo P, Mattsson O, Nahum A E and Roos M 1997 *The Use of Plane-Parallel Ionization Chambers in High-Energy Electron and Photon Beams: an International Code of Practice for Dosimetry* (IAEA Technical Reports Series vol 381) (Vienna: International Atomic Energy Agency)
- Anagnostopoulos G, Andrassy M and Baltas D 2017 The Bebig Valencia-type skin applicators: dosimetric study and implementation of a dosimetric hybrid technique *Brachytherapy* **16** 1044–56
- Andreo P, Burns D T and Salvat F 2012 On the uncertainties of photon mass energy-absorption coefficients and their ratios for radiation dosimetry *Phys. Med. Biol.* **57** 2117–36
- Andreo P et al 2000 *Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy: an International Code of Practice for Dosimetry Based on Standards of Absorbed Dose to Water* (IAEA Technical Reports Series vol 398) (Vienna: International Atomic Energy Agency)
- Andreo P, Wulff J, Burns D T and Palmans H 2013 Consistency in reference radiotherapy dosimetry: resolution of an apparent conundrum when ^{60}Co is the reference quality for charged-particle and photon beams *Phys. Med. Biol.* **58** 6593–621
- Ballester F et al 2015 A generic high-dose rate (192)Ir brachytherapy source for evaluation of model-based dose calculations beyond the TG-43 formalism *Med. Phys.* **42** 3048–61
- Ballester F et al 2009 Evaluation of high-energy brachytherapy source electronic disequilibrium and dose from emitted electrons *Med. Phys.* **36** 4250–6
- Brookhaven National Laboratory 2013 NUDAT 2.6. 'National Nuclear Data Center' (www.nndc.bnl.gov)
- Candela-Juan C et al 2016 Design and characterization of a new high-dose-rate brachytherapy Valencia applicator for larger skin lesions *Med. Phys.* **43** 1639–48
- Cullen D E, Hubbell J H, Kissel L and Laboratory L L N 1997 *EPDL97: the Evaluated Photo Data Library 97 Version* (Uclr-50400 vol 6-Rev) (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory) pp 1–35
- Dzierma Y, Licht N, Nuesken F and Ruebe C 2012 Beam properties and stability of a flattening-filter free 7 MV beam—an overview *Med. Phys.* **39** 2595–602
- Granero D et al 2008 Design and evaluation of a HDR skin applicator with flattening filter *Med. Phys.* **35** 495–503
- Granero D, Vijande J, Ballester F and Rivard M J 2011 Dosimetry revisited for the HDR ^{192}Ir brachytherapy source model mHDR-v2 *Med. Phys.* **38** 487–94
- Granero D et al 2016 Technical Note: dosimetry of Leipzig and Valencia applicators without the plastic cap *Med. Phys.* **43** 2087–90
- Granero D et al 2017 Prescription depth in surface skin brachytherapy *Brachytherapy* **16** S50–1
- Hill R et al 2014 Advances in kilovoltage x-ray beam dosimetry *Phys. Med. Biol.* **59** R183–231
- ICRU 1984 *Stopping Powers for Electrons and Positrons* (ICRU Report vol 37) (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements)
- ICRU 2016 *Key Data for Ionizing Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications* (ICRU Report vol 90) (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements)
- Kawrakow I 2006 On the effective point of measurement in megavoltage photon beams *Med. Phys.* **33** 1829–39
- Ma Y et al 2017 A generic TG-186 shielded applicator for commissioning model-based dose calculation algorithms for high-dose-rate ^{192}Ir brachytherapy *Med. Phys.* **44** 5961–76
- Niu H et al 2004 Dosimetric characteristics of the Leipzig surface applicators used in the high dose rate brachy radiotherapy *Med. Phys.* **31** 3372–7
- Ouhib Z et al 2015 Aspects of dosimetry and clinical practice of skin brachytherapy: the American Brachytherapy Society working group report *Brachytherapy* **14** 840–58
- Perez-Calatayud J et al 2005 A dosimetric study of Leipzig applicators *Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.* **62** 579–84
- Perkins S T, Cullen D E, Seltzer S M and Laboratory L L N 1991 *Tables and Graphs of Electron-Interaction Cross Sections from 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z = 1–100* (Uclr-50400 vol 31) (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory)
- PTW 2017 *Soft X-Ray Ionization Chambers 34013, 23342, 23344 user manual*
- Ribberfors R 1975 Relationship of the relativistic Compton cross section to the momentum distribution of bound electron states *Phys. Rev. B* **12** 2067–74
- Sabbatucci L and Salvat F 2016 Theory and calculation of the atomic photoeffect *Radiat. Phys. Chem.* **121** 122–40

- Salvat F 2015 System for Monte Carlo simulation of electron and photon transport NEA/NSC/DOC(2015)3
- Scofield J H 1978 K- and L-shell ionization of atoms by relativistic electrons *Phys. Rev. A* **18** 963–70
- Sempau J, Acosta E, Baro J, Fernández-Varea J M and Salvat F 1997 An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron–photon transport *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **132** 377–90
- Sempau J, Fernández-Varea J M, Acosta E and Salvat F 2003 Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **207** 107–23
- Tormo A *et al* 2014 Non-melanoma skin cancer treated with HDR valencia applicator: clinical outcomes *J. Contemp. Brachytherapy* **6** 167–72

3 Monte Carlo calculation of beam quality correction factors for PTW cylindrical ionization chambers in photon beams

3.1 Introducció i motivació

El TRS 398 [4], promogut per la IAEA, és un dels protocols més emprats en l'àmbit clínic arreu del món per al calibratge de feixos de fotons de l'ordre del MV mitjançant cambres d'ionització. Està recolzat per la IAEA en col·laboració amb la ESTRO, la WHO i la PAHO. No obstant, tant les dades com el formalisme descrit al TRS 398 requereixen una actualització amb els nous desenvolupaments realitzats des de la seua publicació. L'estat d'aquesta actualització es pot trobar a la publicació [12]. Com a conseqüència, la IAEA ha fomentat una iniciativa internacional amb l'objectiu de proporcionar un conjunt de dades per a l'actualització del TRS 398 amb factors correctors de qualitat de feixos per a l'ús de cambres d'ionització en dosimetria clínic. Per al cas específic de feixos de fotons de l'ordre del MV, un dels objectius de l'actualització del TRS 398 és el de determinar un consens per als valors dels factors correctors de qualitat dels feixos. Aquests, s'obtidran com a mitjana de les dades calculades per diferents grups independents emprant codis de Monte Carlo i dades experimentals mesurades al laboratori. Amb la reproducció independent dels resultats, es pretén reduir les incerteses d'un 1% de l'actual TRS 398 a aproximadament la meitat.

3.2 Objectius

L'objectiu d'aquest treball és calcular els factors correctors de qualitat del feix requerits per actualitzar les dades del TRS 398. Per aconseguir-ho, es caracteritzaran una sèrie de cambres d'ionització cilíndriques fabricades per PTW (Freinburg, Alemanya), les quals són comunament emprades a la clínica per a dosimetria en feixos de fotons de l'ordre del MV.

3.3 Materials i mètodes

Per tal d'obtindre els coeficients correctors k_{Q,Q_0} , tal i com s'ha descrit a la secció 2.4.1, emprarem la metodologia utilitzada a [36]. Per tant, es calcularà, a partir de simulacions Monte Carlo, tant la dosi en un volum menut d'aigua al voltant dels punts d'interès, com la dosi depositada al volum sensible de cada cambra d'ionització. A més, ambdós càlculs es repetiran per a cada feix estudiat. D'altra banda, per tal d'obtenir els factors de qualitat de cada feix, es simularà el dispositiu experimental descrit a la secció

2.4.2. Amb aquestes dades, obtindrem els valors corresponents de k_{Q,Q_0} a partir de l'equació I.23. Els detalls d'aquestes simulacions es descriuran a continuació.

Els feixos estudiats a aquest article són cinc espectres calculats a partir de simulacions MC d'un conjunt d'acceleradors lineals fabricats per *Varian Medical Systems, Inc.* (Palo Alto, CA), amb unes energies màximes de 4 MeV, 6 MeV, 10 MeV, 15 MeV i 24 MeV [133]. Aquests estan inclosos en la distribució del EGSnrc [55] i poden descarregar-se a la seua pàgina web. A banda, per a l'espectre de fotons del ^{60}Co , que s'ha emprat com a feix de referència per a les correccions de qualitat del feix, s'ha pres el descrit pel *Bureau International des Poids et Mesures* (BIPM) [134].

Conjuntament, les cambres fabricades per PTW i estudiades a aquest treball són huit i es llisten a continuació,

Farmer chamber PTW30010

Farmer chamber PTW30011

Farmer chamber PTW30012

Farmer chamber PTW30013

0.07 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31021

0.125 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31010

0.3 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31013

PintPoint 3D chamber PTW31016

Les descripcions tant de les geometries com dels materials d'aquestes ha sigut proporcionades pel fabricant, i es poden veure els esquemes a la figura 1 de l'article adjunt. A més, per a la família de cambres *Farmer*, s'ha inclòs un recobriment de 0.5 mm de PMMA a prova d'aigua.

Referent a les simulacions, el codi emprat per al còmput és el penEasy (v.2015-05-30) on s'empra la llibreria PENELOPE v.2014. Donada la baixa incertesa objectiu d'aquest treball, ha sigut necessari simular un gran nombre d'històries i simular el transport detallat a la zona de les cambres. Açò, junt al gran nombre de combinacions feix-cambra, suposa un temps de simulació inabordable. Per poder aconseguir un temps de còmput assumible, ha sigut necessari l'ús de tècniques de reducció de variància (secció 3.4), les quals s'han calibrat per al cas específic que ens ocupa. En primer lloc, s'ha definit un volum d'aigua que rodeja la cambra. A tots els fotons que arriben a aquest volum, se'ls aplica la tècnica de divisió de partícules o *Splitting*. Al seu torn, tot fotó que abandona aquest volum té una probabilitat de ser eliminat per tècniques de Ruleta Russa. Ambdues tècniques

estan implementades a penEasy i ens permeten concentrar el còmput en la zona d'interès sense introduir un biaix als resultats. Els paràmetres emprats a cada simulació depenen tant de la cambra com del factor de qualitat del feix, i han sigut ajustats a partir d'una sèrie de simulacions curtes de mostreig. Tot i ajustant els paràmetres per arribar a un compromís entre precisió i temps d'execució, es van requerir centenars d'unitats de processament (CPUs) per tal de completar les execucions en un temps de l'ordre de mesos. Aquest fet va ser una de les raons que va motivar l'últim treball que es discutirà al present document, ja que feia evident la necessitat de millorar el rendiment de les simulacions.

Respecte als paràmetres de transport condensat d'electrons en simulacions que involucren cambres d'ionització, tal i com s'ha fet al treball anterior (secció 2), s'ha definit una regió d'aigua que envolta les cambres d'ionització amb un marge de 0.5 mm. A l'interior d'aquesta, i a tots els materials de la cambra, els electrons són simulats de forma detallada, és a dir, sense transport mixt de Classe II. A més, s'ha fixat una energia d'absorció d'1 keV per aquesta regió. El motiu de dita elecció de paràmetres té a veure amb la incertesa estadística objectiu d'aquest treball, un 0.1%. D'altra banda, l'energia d'absorció dels electrons al fantoma, fora de la regió detallada, s'ha fixat a 200 keV, ja que la contribució del camp radiatiu dels electrons per sota d'aquesta energia és inferior al 0.1%. A més, el rang dels electrons amb energies de 200 keV o menors, és inferior al gruix de 0.5 mm de l'envoltant d'aigua de la cambra. Finalment, els paràmetres C1 i C2 s'han fixat a 0.05 en la zona externa a la regió detallada.

Passant a la caracterització del feix, i tenint en compte les consideracions prèvies, s'han realitzat dos tipus de simulació per tal de calcular el valor de k_{Q,Q_0} i del factor de qualitat del feix a partir del $TPR_{20,10}$. A continuació descriurem la configuració d'ambdós tipus de simulació.

3.3.1 Factor corrector de qualitat del feix k_{Q,Q_0}

A aquest treball s'han seguit les indicacions del TRS 398, descrites a la secció 2.4.2, per a la calibració de feixos de fotons d'alta energia. En primer lloc, únicament s'han emprat cambres cilíndriques, les especificacions de les quals es poden trobar a l'article adjunt. A més, s'ha emprat un fantoma d'aigua com a medi de referència, les dimensions del qual són de $30 \times 30 \times 30$ cm³ per tal d'assegurar que el marge entre les parets del fantoma i tant els límits de tots els costats del feix a la profunditat de mesura com de la màxima profunditat de mesura és de, com a mínim, 5 cm. D'altra banda, la distància font-cambra (SCD) per al feix incident de fotons és de 100 cm amb una divergència del feix de 10×10 cm² en la profunditat de mesura. El punt de mesura es situa a 10 cm de la superfície del fantoma, on s'ha situat el punt de referència de les cambres, localitzat al centre del volum

de la cavitat.

Amb aquesta configuració, s'han realitzat dos tipus de simulacions. En primer lloc, s'ha calculat la dosi absorbida en aigua en un volum menut d'aigua sense la cambra d'ionització. Tal i com es recomana a [34], s'ha definit una regió cilíndrica d'1 cm de radi i 0.025 cm d'altura on registrar la dosi absorbida. A l'interior d'aquest volum, es simula el transport tant de fotons com d'electrons fins a una energia d'1 keV. Depenent de l'espectre emprat, s'han simulat entre 10^{10} i 10^{12} històries per tal d'aconseguir una incertesa estadística del 0.1%. Com abans, s'ha fixat una energia d'absorció de 200 keV per als electrons fora d'aquesta regió, ja que el corresponent camp radiatiu en aigua té una contribució menor del 0.1%.

Al segon tipus de simulació, es calcula la dosi mitjana absorbida en el volum actiu d'aire de la cambra d'ionització corresponent. Els paràmetres de simulació emprats són els ja explicats per a simulacions amb cambres d'ionització, assegurant que els electrons produïts a l'envoltant d'aigua poden arribar al volum actiu, mentre que els produïts a l'exterior d'aquesta són absorbits.

3.3.2 Índex de qualitat del feix $TPR_{20,10}$

Les mesures dels índex de qualitat dels feixos $TPR_{20,10}$ (secció 2.4.2), s'han realitzat seguint les indicacions del TRS 398 per a feixos de fotons d'alta energia. Per dur a terme les simulacions d'aquestes mesures s'ha emprat un fantoma d'aigua de $50 \times 50 \times 50$ cm³, situat a una distància SCD de 100 cm i amb una mida de camp del feix de fotons de 10×10 cm² a la profunditat de mesura. Les dues mesures necessàries per obtenir aquest índex es prenen a 20 i 10 cm de la superfície del fantoma d'aigua. La incertesa aconseguida a ambdues mesures està per sota del 0.2%, aconseguint així incerteses estadístiques menors del 0.25% per al càlcul de l'índex $TPR_{20,10}$ de cadascun dels feixos.

3.4 Resultats

Com a resultats del treball, s'han obtingut les corbes dels factors correctors K_Q depenent del factor de qualitat del feix $TPR_{20,10}$ per a cada cambra. Aquestes corbes, s'obtenen a partir de l'ajust de les dades simulades per a cada cambra i cada qualitat de feix, seguint l'expressió seleccionada per emprar-se en la següent actualització del TRS 398,

$$k_Q(TPR_{20,10}) = \frac{1 + \exp\left(\frac{a-0.572}{b}\right)}{1 + \exp\left(\frac{a-TPR_{20,10}}{b}\right)} \quad (\text{II.5})$$

on a i b són els coeficients específics de cada cambra a ajustar, el valor de 0.572 és el valor de $TPR_{20,10}$ per al feix de ^{60}Co i en el factor corrector

k_Q s'ha obviat el subíndex Q_0 , tal i com es recomana quan s'utilitza com a referència el feix de ^{60}Co . En tots els casos, la mitjana quadràtica de les desviacions dels ajustos és menor que el 0.06%.

Els resultats presentats a les figures 2 i 3 de l'article, mostren els factors de correcció de qualitat del feix obtinguts, juntament amb els del TRS 398 original, si existeixen, i l'ajust corresponent a les dades per a l'actualització del TRS 398, on les presentades a aquest treball s'han combinat amb els resultats d'altres grups independents. Les incerteses mostrades a les figures mostren una desviació del 0.4% (línies puntejades).

Cal tenir en compte que en emprar diferents codis de MC és inevitable que sorgisquen diferències entre els resultats, les quals es deuen a contribucions d'errors sistemàtics. A més de les diferències ocasionades per les distintes implementacions dels dos codis emprats, PENELOPE i EGSnrc, també ha de sumar-se la contribució no menyspreable deguda a les diferències en la implementació de la geometria de les diferents cambres d'ionització i les composicions dels materials. Tenint en compte les fonts sistemàtiques d'incertesa, els resultats presentats a aquest treball per als valors de k_Q , per a totes les cambres d'ionització emprades, coincideixen amb les dades proporcionades per altres grups de treball de l'actualització del TRS 398 dins del 0.1% – 0.3% de l'ajust global. L'única cambra que presenta una divergència major és la *Semiflex 3D chamber PTW31021* al punt $TPR_{20,10} = 0.804$, on la desviació respecte l'ajust global és d'un 0.5%. Tot i això, queda dins del rang d'incertesa acceptable. Respecte a l'ajust global, els resultats calculats en aquest treball presenten una mitjana quadràtica de les desviacions del 0.16%.

3.5 Article



PAPER

Monte Carlo calculation of beam quality correction factors for PTW cylindrical ionization chambers in photon beams

RECEIVED
4 December 2019REVISED
20 April 2020ACCEPTED FOR PUBLICATION
20 May 2020PUBLISHED
7 October 2020Vicent Giménez-Alventosa¹ , Vicente Giménez² , Facundo Ballester³ , Javier Vijande^{3,4}  and Pedro Andreo⁵¹ Instituto de Instrumentación para Imagen Molecular (I3M) Centro mixto CSIC—Universitat Politècnica de València, Valencia, Spain² Department of Theoretical Physics, University of Valencia, Burjassot, Spain. Instituto de Física Corpuscular, IFIC (UV-CSIC), Paterna, Spain³ Department of Atomic, Molecular, and Nuclear Physics, University of Valencia, Burjassot, Spain. IRIMED Joint Research Unit (IIS La Fe - UV), Valencia, Spain⁴ Instituto de Física Corpuscular, IFIC (UV-CSIC), Paterna, Spain⁵ Department of Medical Radiation Physics and Nuclear Medicine, Karolinska University Hospital, Stockholm, SwedenE-mail: javier.vijande@uv.es

Keywords: TRS 398, Monte Carlo, dosimetry, ionization chambers, MV photon beams

Abstract

The beam quality correction factor k_Q for megavoltage photon beams has been calculated for eight PTW (Freiburg, Germany) ionization chambers (Farmer chambers PTW30010, PTW30011, PTW30012, and PTW30013, Semiflex 3D chambers PTW31021, PTW31010, and PTW31013, and the PinPoint 3D chamber PTW31016). Simulations performed on the widely used NE-2571 ionization chamber have been used to benchmark the results. The Monte Carlo code PENELOPE/penEasy was used to calculate the absorbed dose to a point in water and the absorbed dose to the active air volume of the chambers for photon beams in the range 4 to 24 MV. Of the nine ionization chambers analysed, only five are included in the current version of the International Code of Practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water (IAEA TRS 398). The values reported in this work agree with those in the literature within the uncertainty estimates and are to be included in the average values of the data obtained by different working groups for the forthcoming update of TRS 398.

1. Introduction

The procedures to be followed for the calibration of clinical megavoltage photon beams using an ionization chamber are described by national and international dosimetry protocols. Such protocols ensure a high level of consistency and reproducibility in determining the absorbed dose, both at the national level, between various radiotherapy clinics in a given country, and internationally. The International Atomic Energy Agency (IAEA) Technical Report Series 398, henceforth referred to as TRS 398 (Andreo *et al* 2000), is one of the most widely used. It has been sponsored by the IAEA in collaboration with ESTRO (European Society for Therapeutic Radiology and Oncology), WHO (World Health Organization) and PAHO (Pan-American Health Organization).

Unlike other international dosimetry protocols used in the past, e.g. TRS 277 (Andreo *et al* 1987) and TRS 381 (Almond *et al* 1997), based on the calibration of ionization chambers in terms of air kerma, TRS 398 is based on ionometric standards of absorbed dose to water, yielding a more direct and simple procedure to relate with clinical practice. Additionally, TRS 398 allows standardizing clinical dosimetry practice while significantly reducing the uncertainties in external beam dosimetry. However, the data and formalism included in TRS 398 were developed in the mid-1990 s. Since that date, a number of important developments have been, or will be in the near future, implemented in clinical practice. The most relevant modifications to take into account, that will be implemented in the forthcoming update of TRS 398 (see its status in Andreo *et al* (2019)), are:

- (i) The ICRU Report Committee 20, whose objective is to specify the fundamental data for measurement standards in ionizing radiation dosimetry, has published a new complete set of data for the determination of the fundamental quantities that affect the associated metrological standards to the reference dosimetry in radiotherapy, the ICRU Report 90 (Seltzer *et al* 2016). Its values have been recommended by the CCRI(I) for use in the standard laboratories (McEwen *et al* 2017).
- (ii) During the last 20 years, new technologies have been implemented in the field of radiotherapy, mainly in megavoltage (MV) photon beams and in proton and heavy ion beams. The use of such beams in clinical practice suffers from outdated standards and protocols data.
- (ii) New ionization chambers have been commercialized that must be characterized for their use in clinical practice.
- (iv) The on-going development to update TRS 398 aims at including recommendations for the dosimetry of radiotherapy beams under non-standard conditions, for example for beams smaller than 10 cm × 10 cm. In recent years there have been a series of advances in the field of small beams, e.g. TRS 483 (Palmans *et al* 2017, 2018), that need to be incorporated in the new edition of TRS 398.

An international multi-centre initiative was put forward by the IAEA with the objective of providing the update of TRS 398 with a validated and consistent new data set of beam quality correction factors for the use of ionization chambers in clinical dosimetry. For MV photon beams, one of the objectives of the TRS 398 update is to determine consensus values of beam quality correction factors, averaged over data obtained by different working groups using validated Monte Carlo codes and experimental data measured in standard laboratories, and to reduce the combined standard uncertainties from the 1% reported in the current TRS 398 to approximately half of this value.

The goal of the present work is to calculate beam quality correction factors required for the update of TRS 398 for several cylindrical ionization chambers manufactured by PTW (Freiburg, Germany) commonly used in the clinic for the dosimetry of MV photon beams. Among the few Monte Carlo (MC) systems available in the literature suitable for this task, the 2014 version of the PENELOPE system has been used.

2. Material and methods

2.1. Monte Carlo code

Simulations were performed using penEasy (v. 2015-05-30), a modular code developed by Sempau *et al* (2011) for the PENELOPE2014 system (Salvat 2015), which simulates electron and photon transport from 50 eV to 1 GeV in any material. All photons, independently of their energies or origin (primary or secondary) are simulated collision-by-collision. For the case of charged particles, PENELOPE allows the user to decide whether all electrons and positrons will be followed (collision-by-collision simulation) until their energies are below a given energy threshold or to use a condensed history technique (CHT). For CHT simulations PENELOPE implements a mixed simulation scheme which distinguishes between hard and soft events. In this approach, hard events (involving angular deflections and/or energy losses above certain energy thresholds) are simulated in a detailed way. All soft collisions encountered between two hard interactions are added together and described by a single artificial event (a hinge, see the PENELOPE manual). This feature is fundamental in the description of the ionization chambers used for measuring MV photon beams, where a collision-by-collision description of all electron and positron interactions is required in several materials. These codes have been widely used and benchmarked by other authors, in particular for the study of MV photon beams (Rodríguez *et al* 2013, Brualla *et al* 2019).

The photoelectric cross sections implemented in PENELOPE are calculated with the code PHOTACS Sabbatucci and Salvat (2016) by using the elementary theory of the atomic photoelectric effect (independent electron model) of Scofield (1973) and Pratt *et al* (1973a, 1973b) to calculate comprehensive tables of excitation and ionization cross-sections. The Rayleigh scattering cross-sections are calculated using non-relativistic perturbation theory, obtaining the atomic form factors from EPDL97 (Cullen *et al* 1997). Compton interactions are modeled taking into account both binding effects and Doppler broadening (Ribberfors 1983). Furthermore, PENELOPE accounts explicitly (Watson and Seuntjens 2016) for the emission of characteristic x rays, Auger and Coster-Kronig electrons that result from vacancies produced in K, L, M and N shells (Perkins *et al* 1991). The simulation of pair- and triplet-production events is modelled by means of a semiempirical model (Baro *et al* 1995). The total cross sections for pair and triplet production are obtained from the XCOM code (Berger *et al* 2010). The reader interested in more details is referred to the Penelope User Manual.

Two different variance reduction techniques have been implemented allowing us to perform detailed simulations in the chamber active volume. To do so, a water volume surrounding the chamber was defined. All photons arriving at such volume were subjected to Particle Splitting while those leaving it were subjected

to Russian Roulette. These two techniques are implemented in the penEasy code. The required parameters, water volume dimensions, splitting factor (S_F), minimum weight (W_{\min}), survival probability (S_p), and maximum weight (W_{\max}), were specified for each chamber after performing several short simulations using a simple rule-of-thumb to correlate these parameters in an efficient and straightforward way. For a given a value of S_F , $W_{\min} = 1/S_F + 0.001$, $S_p = 1/S_F$, and $W_{\max} = S_F - 0.01$. The S_F values used were in the range 10–40, generating an increase in the numerical efficiency by a factor 5 to 15 depending on the beam quality and ionization chamber.

A water envelope with a thickness of 0.5 mm surrounding the ionization chambers has been implemented. There, a detailed simulations of electrons, i.e. without resorting to the mixed (Class II) algorithm incorporated in PENELOPE, using an energy cutoff of 1 keV has been performed. The rationale for such thickness arises from our Type A uncertainty target, 0.1%. To maintain every piece in our simulation consistently within that goal, the electron energy cutoff for the water phantom has been chosen to be 200 keV, since the radiation yield in water for electrons below that energy is smaller than 0.1%. At the same time, 200 keV electrons will not reach the ionization chamber from distances farther than their range, 0.5 mm.

The stability of PENELOPE CHT algorithm, specially using rather conservative values of C1 and C2 like the ones used in this work for the outer water volume, has been thoroughly discussed in the literature, see Salvat (2015) for a selection of simulations addressing this issue. Nevertheless, to test in these particular geometries the independence of the results with respect to the particular values chosen for C1 and C2, we have repeated the simulation of the ionization chamber PTW31013 and the beam quality TPR20,10 = 0.763 using C1 = C2 = 0.005 instead of the standard value of C1 = C2 = 0.05. The simulation was carried out at the IFIC Grid-CSIC cluster (nodes being a 2xQuad Core Xeon E5420 @ 2.50 GHz) using the ifort compiler (version 2019 update 5), doubling the calculation time (from 8×10^6 seconds per datapoint to 15×10^6 seconds). The difference obtained with respect to the baseline case is less than 0.02%, well within the 0.1% Type A uncertainty goal.

The main characteristics and parameters used for the Monte Carlo simulations are summarized in table 1, which follows the recommendations of the Task Group 268 of the American Association of Physicists in Medicine (AAPM), see Sechopoulos *et al* (2018).

2.2. TRS 398 formalism and the beam quality correction factor k_{Q,Q_0} .

As inferred from the Introduction, the international protocol of choice in this work has been IAEA TRS 398 (Andreo *et al* 2000). In its formalism, the absorbed dose to water for a reference beam of quality Q_0 using an ionization chamber calibrated in terms of absorbed dose to water is determined by

$$D_{w,Q_0} = M_{Q_0} N_{D,w,Q_0}, \quad (1)$$

where M_{Q_0} is the dosimeter reading under reference conditions, corrected for influence quantities, and N_{D,w,Q_0} is the chamber calibration coefficient at the reference beam quality.

When the user clinical beam has a quality Q different from the reference quality Q_0 , equation (1) is modified to

$$D_{w,Q} = M_Q N_{D,w,Q_0} k_{Q,Q_0}, \quad (2)$$

where k_{Q,Q_0} is the beam quality correction factor, which corrects the N_{D,w,Q_0} calibration coefficient for the difference between the reference beam quality, Q_0 , and the user quality, Q . From equations (1) and 2, the beam quality correction factor can be obtained from measurements performed at standards laboratories as

$$k_{Q,Q_0} = \frac{N_{D,w,Q}}{N_{D,w,Q_0}}. \quad (3)$$

TRS 398 emphasizes that k_{Q,Q_0} values measured specifically for the user's ionization chamber should be used in all cases when available. Unfortunately, this is not the case for a large number of clinical beam qualities and ionization chambers. Additionally, in the past these coefficients have been evaluated theoretically using Bragg-Gray cavity theory together with ICRU 37 data (Berger *et al* 1984). Such approach relies on different approximations, particularly with regard to the procedures to obtain chamber perturbation correction factors, which increase the uncertainty of the k_{Q,Q_0} values in TRS 398.

An alternative method was proposed by Sempau *et al* (2004) relying solely on detailed MC simulations. This is now the standard technique and has become the cornerstone of the forthcoming update of TRS 398. Using state-of-the-art MC together with a detailed modelling of the geometry of the ionization chamber, it is possible to evaluate both the absorbed dose at a point in water, approximated by a very small water volume,

Table 1. Summary of the main characteristics and parameters for the PENELOPE/penEasy Monte Carlo simulations in this work.

Item	Description	References
Code	1) PENELOPE2014, 2) penEasy (v. 2015-05-30. Compiled with Intel IFOR (ifc) 19.0.3.199 using the -fast optimization flag.	1) Salvat (2015); 2) Sempau <i>et al</i> (2011)
Validation	Previously validated	Sempau <i>et al</i> (2003), Sempau <i>et al</i> (2011), Rodriguez <i>et al</i> (2013)
Timing	Energy absorbed to water and to air took 2800 and 11000 hours, respectively, for each energy beam and ionization chamber (CPU time is the total sum of parallel processes). All simulations performed with 10^{10} to 10^{12} histories to achieve uncertainty target.	Parallel process computation designed in-house
Source description	Standard photon energy spectra taken from the literature.	Mohan <i>et al</i> (1985)
Cross-sections	1) Photoelectric calculated with PHOTACS, 2) Rayleigh scattering using non-relativistic perturbation theory, 3) Compton based on Relativistic Impulse Approximation, 4) Atomic relaxation using EADL transition probabilities, 5) Electron-positron pair production follows a semiempirical model	1) Sabbatucci and Salvat (2016); 2) Cullen <i>et al</i> (1997); 3) Ribberfors (1983); 4) Watson and Seuntjens (2016), Deslattes <i>et al</i> (2003), Bearden (1967); 5) Baro <i>et al</i> (1995)
Transport parameters	Photon and electron energy cutoff = 1 keV, transport parameters C1 = C2 = 0 in the ionization chambers materials and in a water volume envelope. Electron energy cutoff = 200 keV, transport parameters C1 = C2 = 0.05 in the outer water volume.	Salvat (2015), Sempau and Andreo (2006)
Variance reduction techniques	Russian roulette, splitting particles	Salvat (2015), Sempau and Andreo (2006)
Scored quantities	Absorbed dose in air and water	
Statistical uncertainties	$\leq 0.1\%$ ($k = 2$), maximum uncertainty of all calculated quantities	
Statistical method	History-by-history	Salvat (2015)
Post-processing	None	

$D_{w,Q}$, and the mean absorbed dose to the ionization chamber active volume, $D_{air,Q}$, with a high degree of accuracy. In doing so, k_{Q,Q_0} becomes defined as

$$k_{Q,Q_0} = \frac{D_{w,Q}/D_{air,Q}}{D_{w,Q_0}/D_{air,Q_0}}. \quad (4)$$

For high energy photon beams, the most common reference beam quality is ^{60}Co gamma rays. In this case, the standard notation is to omit the subscript Q_0 in all quantities; hence, the beam quality factor k_{Q,Q_0} is referred to as k_Q .

2.3. Simulation configuration for the beam quality correction factor k_Q

TRS 398 establishes reference conditions for the calibration of megavoltage photon beams that have also been used for the simulation of high energy photon beams in this work. First, only cylindrical ionization chambers are recommended for reference dosimetry. Second, a water phantom is recommended as the reference medium. The phantom has to extend a minimum distance of 5 cm beyond all the sides of the beam size at the depth of measurement and to also extend 5 cm beyond the maximum depth of measurement. These conditions were implemented in the simulations, for which a $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ water phantom was considered. The density and I -value (mean excitation energy) of water were those recommended in ICRU 90.

The incident photon spectra were defined in a source-to-chamber distance (SCD) configuration as a divergent beam with a $10 \times 10 \text{ cm}^2$ size at the calculation depth, emitted from a point source 100 cm upwards from the chamber. The calculation depth was 10 cm, this being the distance from the phantom surface to the reference point of the chambers, located on the central axis of their active air volume.

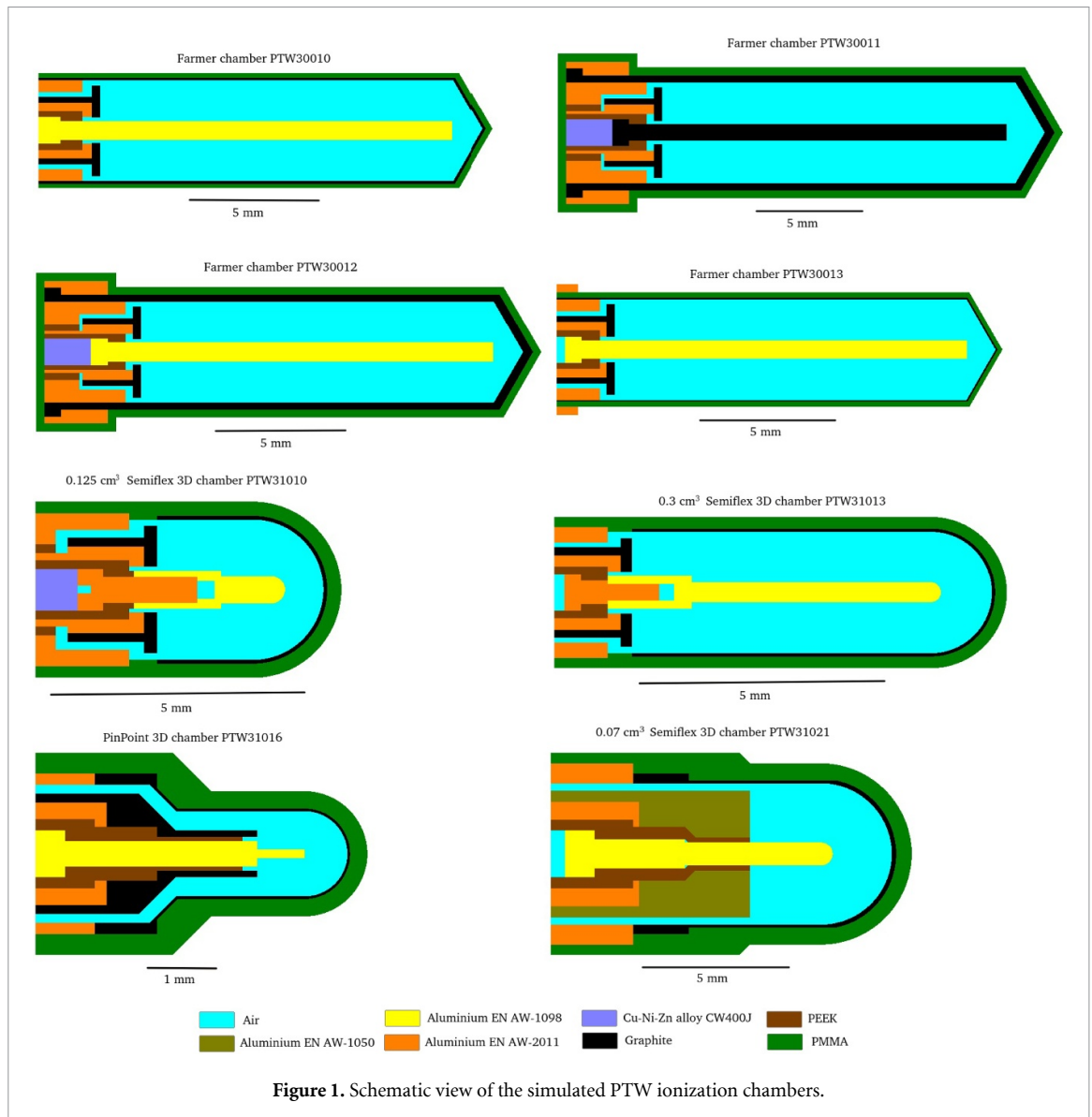


Figure 1. Schematic view of the simulated PTW ionization chambers.

Two different simulations were performed using the above geometry configuration. The first one calculated the absorbed dose to water in a small water volume (without the ionization chamber). As in Kawrakow (2006), the dose was scored in a cylindrical voxel of 1 cm radius and 0.025 cm height. Within this voxel all electrons and photons were transported down to an energy of 1 keV. The number of simulated histories was in the range 10^{10} to 10^{12} , depending on the spectra considered, to achieve the Type A uncertainty goal of 0.1%. Based on this objective, an energy transport cut-off of 200 keV was chosen for electrons in the rest of the water phantom. The rationale behind this number is twofold: on the one hand the electron range for this cut-off value is smaller than 0.05 cm, and therefore electronic equilibrium in the target voxel can be assumed; on the other hand, the radiation yield in water is less than 0.1%, therefore being consistent with our accuracy goal.

The second simulation calculated the mean absorbed dose to air in the ionization chamber active volume. In this case, all electrons and photons down to an energy of 1 keV were simulated in a collision-by-collision mode within the detector materials and in a 0.05 cm-thick water shell surrounding the chamber. Outside this shell, an energy cut-off of 200 keV was set for the electrons, whose transport was simulated using the condensed-history mode. This procedure ensured that electrons produced in the water shell were able to reach the chamber, whereas those generated outside the shell were absorbed before reaching it. The material properties for water, graphite and air were those of ICRU 90, already included in the PENELOPE database.

2.4. Simulation configuration for the beam quality index $TPR_{20,10}$

For high energy photon beams delivered by clinical accelerators the beam quality index recommended by TRS 398 is the tissue phantom ratio $TPR_{20,10}$. As is well-known, this parameter corresponds to the ratio of

Table 2. Main dimensions of the ionization chamber models used.

Ionization chamber	Cavity volume (cm ³)	Cavity length (mm)	Cavity radius (mm)	Wall material	Wall thickness (g/cm ²)	Central Electrode material	Waterproof
PTW30010	0.6	23.0	3.05	Graphite	0.017	Aluminum	N
PTW30011	0.6	23.0	3.05	Graphite	0.079	Graphite	N
PTW30012	0.6	23.0	3.05	Graphite	0.079	Aluminum	N
PTW30013	0.6	23.0	3.05	Graphite	0.017	Aluminum	N
PTW31021	0.07	4.8	2.4	Graphite	0.017	Aluminum	Y
PTW31010	0.125	6.5	2.75	Graphite	0.028	Aluminum	Y
PTW31013	0.13	16.25	2.75	Graphite	0.028	Aluminum	Y
PTW31016	0.016	2.9	1.45	Graphite	0.017	Aluminum	Y

Table 3. Beam quality indices TPR_{20,10} calculated for the photon spectra used in this work Mohan *et al* (1985). Type A uncertainties are provided for a coverage factor $k = 2$.

Beam	This work	Czarnecki <i>et al</i> (2018)
⁶⁰ Co	0.572(2)	0.571
4 MV	0.628(2)	0.628
6 MV	0.670(2)	0.670
10 MV	0.729(2)	0.731
15 MV	0.763(2)	0.763
24 MV	0.804(2)	0.805

Table 4. Beam quality correction factors, k_Q , for the NE-2571 and the eight PTW ionization chambers simulated in this work. Type A uncertainties are indicated within parenthesis for a coverage factor $k = 2$.

TPR _{20,10}	0.628	0.670	0.729	0.763	0.804
NE-2571	0.9971(14)	0.9931(15)	0.9830(15)	0.9739(15)	0.9594(15)
PTW30010	0.9962(11)	0.9907(10)	0.9799(10)	0.9710(9)	0.9555(9)
PTW30011	0.9954(10)	0.9901(10)	0.9798(10)	0.9692(10)	0.9549(11)
PTW30012	0.9960(12)	0.9925(11)	0.9821(11)	0.9721(10)	0.9580(10)
PTW30013	0.9954(9)	0.9904(10)	0.9791(10)	0.9703(10)	0.9543(10)
PTW31021	0.9956(11)	0.9926(11)	0.9823(11)	0.9725(10)	0.9588(10)
PTW31010	0.9947(10)	0.9879(12)	0.9772(12)	0.9677(11)	0.9525(10)
PTW31013	0.9971(11)	0.9911(10)	0.9802(11)	0.9705(10)	0.9560(9)
PTW31016	0.9967(14)	0.9913(14)	0.9797(14)	0.9709(14)	0.9535(13)

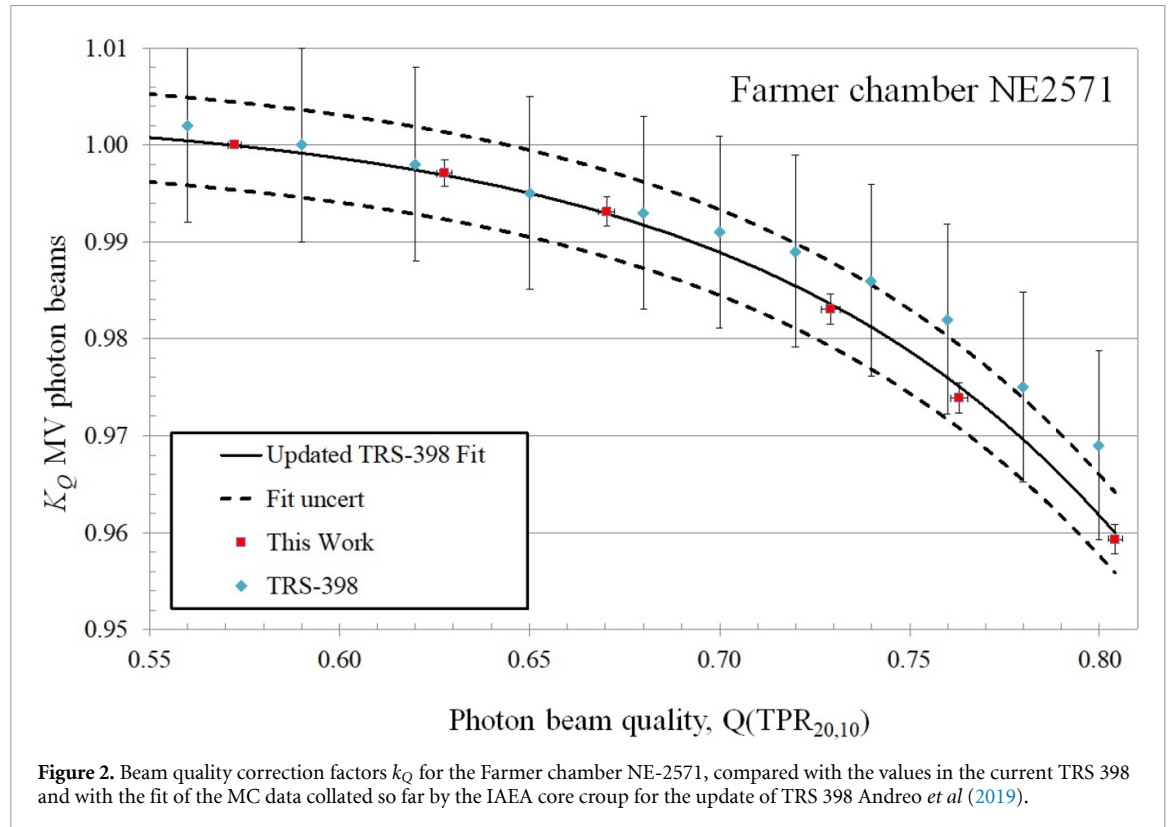
absorbed doses at 20 and 10 cm depths in a water phantom using a SCD configuration and a field size of $10 \times 10 \text{ cm}^2$ at the respective depths. The MC simulations were performed in a $50 \times 50 \times 50 \text{ cm}^3$ water phantom using the same energy cut-offs and transport parameters described above for the MC simulations in the water phantom. The uncertainty goal for each simulation was 0.2%, leading to a Type A uncertainty for TPR_{20,10} smaller than 0.25% in all cases.

2.5. Photon spectra

Five MV photon spectra from Mohan *et al* (1985) were considered as radiation sources using the configuration described above. These spectra had been obtained with MC simulations of a series of linear accelerators manufactured by Varian Medical Systems, Inc. (Palo Alto, CA) with maximum photon energies of 4 MeV, 6 MeV, 10 MeV, 15 MeV, and 24 MeV. The spectra are included in the standard EGSnrc distribution (Kawrakow *et al* 2019) and can be downloaded from the EGSnrc website. For the ⁶⁰Co photon spectra to be used as reference beam quality, different spectra available in the literature were tested, finding negligible differences in the results; the spectrum of the Bureau International des Poids et Mesures (BIPM) described by Burns (2003) was selected for the calculations. Benchmark simulations using more recent MV photon spectra by Brualla *et al* (2019) have been performed to ensure the independence of our results with respect to the particularities of the spectra used.

Table 5. Fitting coefficients for equation (5), in terms of $\text{TPR}_{20,10}$, for the NE-2571 and the PTW ionization chambers simulated in this work. The rms deviations of the fits from the corresponding k_Q values are smaller than 0.06%.

	a	b
NE-2571	1.09714	-0.09581
PTW30010	1.12531	-0.10956
PTW30011	1.13974	-0.11592
PTW30012	1.11121	-0.10219
PTW30013	1.12985	-0.11239
PTW31021	1.11961	-0.10448
PTW31010	1.17606	-0.13285
PTW31013	1.12097	-0.10776
PTW31016	1.09278	-0.09904



2.6. Ionization chambers

Eight cylindrical ionization chambers manufactured by PTW were simulated. These were:

- Farmer chamber PTW30010
- Farmer chamber PTW30011
- Farmer chamber PTW30012
- Farmer chamber PTW30013
- 0.07 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31021
- 0.125 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31010
- 0.3 cm³ Semiflex 3D chamber PTW31013
- PinPoint 3D chamber PTW31016

Detailed schemes and blueprints were provided by the manufacturer. For the vented ionization chambers (Farmer type), a 0.5 mm-thick PMMA waterproofing sleeve was included. Schematic diagrams of the eight ionization chambers and their materials are shown in figure 1. Their main dimensions are listed in table 2.

To benchmark the chamber simulations, the widely used Farmer-type ionization chamber NE-2751, was also simulated. Its geometry and composition are well described in the literature (Aird and Farmer 1972, Wulff *et al* 2008).

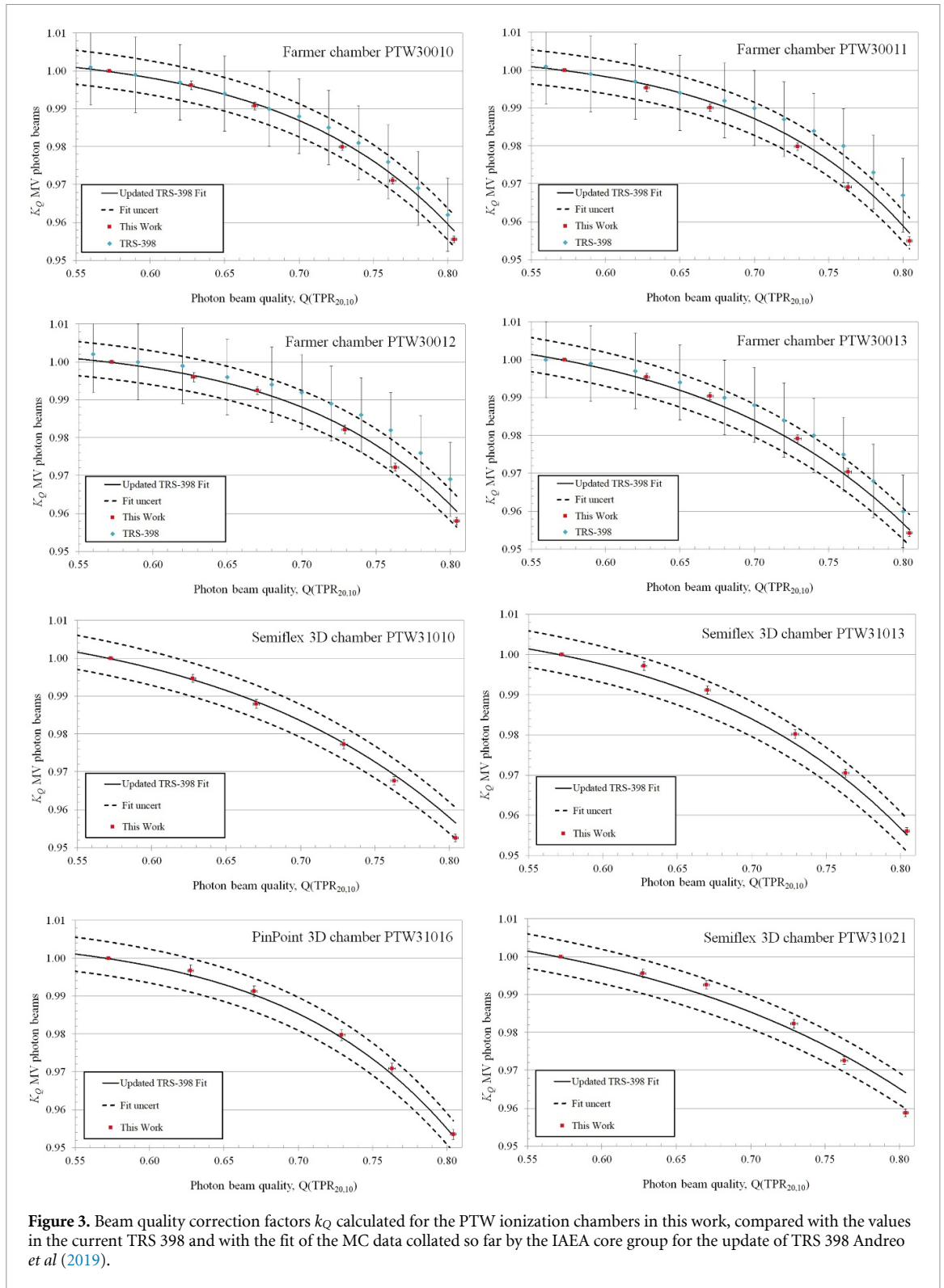


Figure 3. Beam quality correction factors k_Q calculated for the PTW ionization chambers in this work, compared with the values in the current TRS 398 and with the fit of the MC data collated so far by the IAEA core group for the update of TRS 398 Andreo *et al* (2019).

3. Results

3.1. Beam quality index, $TPR_{20,10}$

The calculated values for the beam quality index are given in table 3, together with the corresponding values obtained by Czarnecki *et al* (2018) using the same photon spectra.

3.2. Beam quality correction factor, k_Q

Results for the beam quality correction factors are given in table 4 for the ionization chambers listed in previous sections.

Using the equation to fit the k_Q data as a function of $\text{TPR}_{20,10}$ in the forthcoming update of TRS 398, which has the functional form

$$k_Q(\text{TPR}_{20,10}) = \frac{1 + \exp\left(\frac{a - 0.572}{b}\right)}{1 + \exp\left(\frac{a - \text{TPR}_{20,10}}{b}\right)}, \quad (5)$$

where a and b are specific parameters for each chamber type, and the value 0.572 is the $\text{TPR}_{20,10}$ for ^{60}Co in table 3 (forcing $k_Q = 1$ for this reference quality), yields the coefficients given in table 5 for the calculated $\text{TPR}_{20,10}$ values of the megavoltage beams in this work. The root mean square (rms) deviations of the fits was smaller than 0.06% in all cases.

4. Discussion

Figures 2 and 3 show the beam quality correction factors k_Q obtained in this study, compared with the data in the current TRS 398 and with fitted values of the MC and experimental data collated so far by the IAEA core working group for the update of TRS 398 (Andreo *et al* 2019). The core group fits have been made for data obtained independently by different working groups, where the MC data were calculated with various MC codes and input photon spectra, up to a total of 17 to 70 data points for the PTW ionization chambers and 132 for the NE-2571. The results of the present work have also been included in the fits. The uncertainties shown for the fit correspond to an estimated relative standard uncertainty ($k = 2$) of about 0.4%, i.e. approximately the 95% predictions intervals shown as dashed lines. For completeness, the k_Q values given in the current TRS 398 have been included in the figures when available, their relative standard uncertainty being 1%.

Agreement between MC simulations performed independently may be affected by unavoidable different sources of Type B uncertainty. In addition to the intrinsic minor differences between the two MC systems used, Penelope and EGSnrc, a relevant contribution corresponds to differences in the implementation of the ionization chamber geometries and the specification of their material compositions. Their effect, or the lack of them, can be seen in Fig 2 showing the fit to benchmark determinations made for the NE-2571 ionization chamber consisting of 132 MC and experimental data points (see also figure 1 in Andreo *et al* (2019)). In this case, where the ionization chamber geometry is widely known and has been thoroughly studied by multiple authors (Muir and Rogers 2010, Andreo *et al* 2013, Mainegra-Hing and Muir 2018, Czarnecki *et al* 2018), the different datasets yield a Type A uncertainty of about 0.3%.

In addition to the NE-2571, of the eight PTW ionization chamber studied in this work, only four of them (the Farmer chambers PTW30010, 30011, 30012, 30013) had been included in the current TRS 398. Following the trend obtained previously by other authors using ICRU 37 data, e.g. Wulff *et al* (2008), Muir and Rogers (2010), etc, our calculated k_Q values are lower than those in the original TRS 398: for $\text{TPR}_{20,10}$ values below about 0.70 the differences are small, being within 0.01%-0.5%, but differ by up to 1.7% for the PTW30011 and 30012 chambers in the 24 MV beam. For all the ionization chambers studied, our calculated k_Q values agree with the data provided by other working groups for the TRS 398 update within 0.1%-0.3% of the overall fits. The only outlier is the value for the Semiflex 3D chamber PTW31021 at $\text{TPR}_{20,10} = 0.804$, which deviates 0.5% from the global fit, though still leads to an acceptable uncertainty. Our results yield a rms difference with respect to the on-going TRS 398 update fit of 0.16%. Therefore, the combined relative standard uncertainty for the present k_Q values can be estimated to be of the order of 0.25% ($k = 2$).

5. Conclusions

The goal of the TRS 398 update with regard to photon beam quality correction factors is to determine k_Q values averaged over data obtained by different international working groups using validated Monte Carlo codes, reducing their standard uncertainty from the 1% estimation given in the current TRS 398. This manuscript addresses this issue for eight PTW cylindrical ionization chambers, calculating their beam quality correction factors for photon beams from 4 MV to 24 MV. Of the eight ionization chambers, four (the Farmer chambers PTW30010, PTW30011, PTW30012, and PTW30013) were included in the previous edition of TRS 398, in addition to the NE-2571. The chambers Semiflex 3D PTW31021, PTW31010, PTW31013, and Pinpoint 3D PTW31016 were not. Calculations based on state-of-the-art MC simulations using the PENELOPE/penEasy code have been performed yielding relative standard uncertainties smaller than about 0.25%, well below the 1% stated in the current edition of TRS 398. To verify the performance of the calculations, a benchmark simulation was conducted for the widely used ionization chamber NE-2571. In all cases the results obtained agree within the stated uncertainties with those obtained independently by

different working groups for the planned update of TRS 398. For the chambers included in the current TRS 398, the k_Q values calculated in this work are lower than those given in the protocol, following the trend obtained by other authors.

Acknowledgments

The authors wish to thank PTW for kindly providing the blueprints required for this study. This work has been partially funded by FEDER/MCIyU-AEI under grants PGC2018-101302-B and FPA2017-84543-P, by the Severo Ochoa Excellence Program under grant SEV-2014-0398 and by Generalitat Valenciana through the projects AICO/2019/132 and PROMETEO/2019/087. The authors also acknowledge the use of Tirant (University of Valencia), node in the Spanish Supercomputing Network, the hydrateo and Dresden cluster (University of Valencia), and the IFIC-GRID computing centre. PA acknowledges the contribution and data of the core group and the international working groups for the update of IAEA TRS 398.

ORCID iDs

Vicent Giménez-Alventosa  <https://orcid.org/0000-0003-1646-6094>

Vicente Giménez  <https://orcid.org/0000-0003-3855-2567>

Facundo Ballester  <https://orcid.org/0000-0002-3785-8399>

Javier Vijande  <https://orcid.org/0000-0002-9568-8236>

References

- Aird E G A and Farmer F T 1972 The design of a thimble chamber for the Farmer dosimeter *Phys. Med. Biol.* **17** 169–74
- Almond P, Andreo P, Mattson O, Nahum A and Roos M 1997 The use of Plane-Parallel Ionization Chambers in High-Energy Electron and Photon Beams: An International Code of Practice for Dosimetry *IAEA Technical Reports Series no. 381* (Vienna: International Atomic Energy Agency)
- Andreo P, Burns D T, Hohlfeld K, Huq M S, Kanai T, Laitano F, Smyth V G and Vynckier S 2000 Absorbed dose determination in external beam radiotherapy: An International Code of Practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water *IAEA Technical Reports Series no. 398* (Vienna: International Atomic Energy Agency)
- Andreo P, Cunningham J C, Hohlfeld K and Svensson H 1987 Absorbed Dose Determination in Photon and Electron Beams: An International Code of Practice *IAEA Technical Reports Series no. 277* (Vienna: International Atomic Energy Agency) (2nd edn in 1997)
- Andreo P, Wulff J, Burns D T and Palmans H 2013 Consistency in reference radiotherapy dosimetry: resolution of an apparent conundrum when ^{60}Co is the reference quality for charged-particle and photon beams *Phys. Med. Biol.* **58** 6593–621
- Andreo P, Burns D T, Kapsch R-P, McEwen M and Vatnitsky S 2019 Status of the update of the IAEA TRS-398 code of practice *Book of Extended Synopses p 71-76, International Symposium Standards, Applications and QA in Dosimetry MR (IDOS 2019)* (Vienna: International Atomic Energy Agency)
- Baro J, Sempau J, Fernandez-Varea J and Salvat F 1995 PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter *Nucl. Inst. Method. Phys. B* **100** 31–46
- Bearden J A 1967 X-ray wavelengths *Rev. Mod. Phys.* **39** 78–124
- Berger M, Hubbell J, Seltzer S, Chang J, Coursey J, Sukumar R, Zucker D and Olsen K 2010 *Xcom: Photon Cross Section Database (Version 1.5)* (<http://physics.nist.gov/xcom>) (Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology)
- Berger M J, Inokuti M, Andersson H H, Bichsel H, Dennis J A, Powers D, Seltzer S M and Turner J E 1984 Stopping Powers for Electrons and Positrons *ICRU Report 37* (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements)
- Brualla L, Rodríguez M, Sempau J and Andreo P 2019 PENELOPE/PRIMO-calculated photon and electron spectra from clinical accelerators *Radiat. Oncol.* **14** 6
- Burns D T 2003 Calculation of k_{wall} for ^{60}Co air-kerma standards using PENELOPE *Report CCRI(I)/03-40* (Sèvres: Bureau International des Poids et Mesures)
- Cullen D E, Hubbell J H and Kissel L 1997 EPDL97: the Evaluated Photon Data Library, '97 Version *Report UCRL-50400 vol 6 Rev 5* (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory)
- Czarnecki D, Poppe B and Zink K 2018 Impact of new ICRU Report 90 recommendations on calculated correction factors for reference dosimetry *Phys. Med. Biol.* **63** 15515
- Deslattes R D, Kessler E G, Indelicato P, deBilly L, Lindroth E and Anton J 2003 X-ray transition energies: new approach to a comprehensive evaluation *Rev. Mod. Phys.* **75** 35–99
- Kawrakow I 2006 On the effective point of measurement in megavoltage photon beams *Med. Phys.* **33** 1829–39
- Kawrakow I, Mainegra-Hing E, Rogers D W O, Tessier F and Walters B R B 2019 The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport *NRCC Report PIRS-701* (Ottawa: National Research Council Canada)
- Mainegra-Hing E and Muir B R 2018 On the impact of ICRU Report 90 recommendations on k_Q factors for high-energy photon beams *Med. Phys.* **45** 3904–8
- McEwen M, Burns D T, Darienzo M, de Pooter J, Pinto M and Rapp B 2017 Report to CCRI(I) on the recommendations of ICRU Report 90 *Report CCRI(I)/17-07* (Sèvres: Bureau International des Poids et Mesures)
- Mohan R, Chui C and Lidofsky L 1985 Energy and angular distributions of photons from medical linear accelerators *Med. Phys.* **12** 592–7
- Muir B R and Rogers D W O 2010 Monte Carlo calculations of k_Q , the beam quality conversion factor *Med. Phys.* **37** 5939–50
- Palmans H, Andreo P, Huq M S, Seuntjens J and Christaki K 2017 Dosimetry of Small Static Fields used in External Beam Radiotherapy: An IAEA-AAPM international Code of Practice for reference and relative dose determination *IAEA Technical Reports Series no. 483* (Vienna: International Atomic Energy Agency)

- Palmans H, Andreo P, Huq M S, Seuntjens J, Christaki K E and Meghzifene A 2018 Dosimetry of small static fields used in external photon beam radiotherapy: Summary of TRS-483, the IAEA-AAPM international Code of Practice for reference and relative dose determination *Med. Phys.* **45** e1123–e1145
- Perkins S T, Cullen D E, Chen M H, Hubbell J H, Rathkopf J A and Scofield J H (1991) *Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), Z = 1-100* Report UCRL-ID-50400 vol. 30, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA
- Pratt R H, Ro A and Tseng H K 1973a Atomic photoelectric effect above 10 keV *Rev. Mod. Phys.* **45** 273–325
- Pratt R H, Ro A and Tseng H K 1973b Atomic photoelectric effect above 10 keV *Rev. Mod. Phys.* **45** 663 (erratum)
- Ribberfors R 1983 X-ray incoherent scattering total cross sections and energy-absorption cross sections by means of simple calculation routines (erratum) *Phys. Rev. A* **27** 3061–70
- Rodríguez M, Sempau J and Brualla L 2013 PRIMO: A graphical environment for the Monte Carlo simulation of Varian and Elekta linacs *Strahlenther. Onkol.* **189** 881–6
- Sabbatucci L and Salvat F 2016 Theory and calculation of the atomic photoeffect *Radiat. Phys. Chem.* **121** 122–40
- Salvat F 2015 PENELOPE-2014: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport *Report NEA/NSC/DOC(2015)3* (Issy-les-Moulineaux: OECD Nuclear Energy Agency)
- Scofield J H 1973 Theoretical photoionization cross sections from 1 to 1500 keV *Report UCRL-51326* (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory)
- Sechopoulos I, Rogers D W O, Bazalova-Carter M, Bolch W E, Heath E C, McNitt-Gray M F, Sempau J and Williamson J F 2018 RECORDS: Improved reporting of Monte Carlo radiation transport studies: report of the AAPM research committee task group 268 *Med. Phys.* **45** e1–e5
- Seltzer S M, Fernández-Varea J M, Andreo P, Bergstrom P M, Burns D T, Krajcar-Bronic I, Ross C K and Salvat F 2016 Key Data for Ionizing Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications *ICRU Report 90* (Bethesda, MD: Int. Commission on Radiation Units and Measurements)
- Sempau J, Acosta E, Baró J, Fernández-Varea J M and Salvat F 2003 Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE *Nucl. Instr. Meth. B* **207** 107–23
- Sempau J and Andreo P 2006 Configuration of the electron transport algorithm of PENELOPE to simulate ion chambers *Phys. Med. Biol.* **51** 3533–48
- Sempau J, Andreo P, Aldana J, Mazurier J and Salvat F 2004 Electron beam quality correction factors for plane-parallel ionization chambers: Monte Carlo calculations using the PENELOPE system *Phys. Med. Biol.* **49** 4427–44
- Sempau J, Badal A and Brualla L 2011 A PENELOPE-based system for the automated Monte Carlo simulation of clinacs and voxelized geometries *Med. Phys.* **38** 5887–95
- Watson P G F and Seuntjens J 2016 Effect of explicit M and N shell atomic transitions on a low-energy x-ray source *Med. Phys.* **43** 1760–3
- Wulff J, Heverhagen J T and Zink K 2008 Monte Carlo-based perturbation and beam quality correction factors for thimble ionization chambers in high-energy photon beams *Phys. Med. Biol.* **53** 2823–36

4 PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE

4.1 Introducció i motivació

Com hem vist al llarg d'aquest document, les simulacions basades en Monte Carlo són un referent en quant a càlcul de deposició de dosi, entre altres aplicacions. El problema principal és la incertesa estadística inherent al mètode, que com hem vist a la secció 3.3, es redueix com $1/\sqrt{N}$, sent N el nombre d'històries. D'altra banda, el temps de còmput sol tenir un comportament lineal amb el nombre d'històries, el que significa que per a reduir la incertesa estadística un factor 10, s'ha d'augmentar el temps de còmput aproximadament en un factor 100. Com a conseqüència, a alguns dels treballs anteriors s'han emprat temps d'execució de l'ordre de mesos, disposant aproximadament de 700 cors de processament per a aconseguir les incerteses estadístiques requerides.

D'altra banda, els diferents codis de Monte Carlo disponibles hui en dia, tenen una aplicabilitat limitada. Açò es deu al gran nombre de possibles configuracions en les simulacions, com geometries, rangs d'energia, tipus de partícules, models físics etc. Com a conseqüència, al llarg dels anys s'han desenvolupat diferents codis de Monte Carlo, a més de derivats per aplicacions específiques. Cal destacar que al cas de GEANT4, s'ha aconseguit que proporcione suport per a pràcticament qualsevol àmbit d'aplicació, gràcies a la seua estructura extremadament modular i l'ús extens dels polimorfisme amb mètodes virtuals (secció 4.3). No obstant, al centrar el seu disseny en proporcionar un codi tan flexible, s'ha penalitzat en gran mesura l'eficiència, sent, en general, significativament més lent que la resta d'opcions.

Estos fets, posen de manifest la necessitat d'un codi Monte Carlo balancejat, és a dir, amb un bon compromís entre flexibilitat i eficiència, per a que pugua estendre's a diferents àmbits d'aplicació sense sacrificar gran part de la velocitat de còmput.

Com hem vist als treballs publicats al present document, PENELOPE és un referent en temes de física mèdica, per destacar en la seua implementació de la física electromagnètica d'electrons i positrons. A més, al contrari que altres opcions, no ha sigut desenvolupat per una gran col·laboració, el que probablement ha contribuït a que el seu codi font i estructura siga relativament simple. D'altra banda, cal destacar que és un projecte de codi obert, i que és eficient en comparació a altres codis. Totes les característiques mencionades són les que han propiciat que a aquest treball s'elegisca PENELOPE com a codi base per a desenvolupar un codi Monte

Carlo derivat, l'objectiu del qual és oferir flexibilitat alhora que eficiència. De fet, molts treballs previs han emprat PENELOPE com a codi base per crear versions paral·lelitzades i/o optimitzades per a àmbits específics [101, 102, 135, 136, 137].

4.2 Objectius

L'objectiu principal d'aquest treball és desenvolupar el codi al que s'ha anomenat PenRed (Parallel ENgine for Radiation Energy Deposition), el qual proporciona una versió flexible, optimitzada i paral·lela de les característiques implementades al paquet PENELOPE original. A més, tot i ser completament genèric, es vol facilitar el seu ús en l'àmbit de la física mèdica, pel que s'implementaran característiques específiques per aquest propòsit. PenRed es pot descarregar a partir d'un repositori públic al github² i al *softwareheritage*³.

4.3 Materials i mètodes

Per tal d'aconseguir els objectius plantejats, en primer lloc, s'han volgut aplicar tècniques d'optimització com les discutides a la secció 4. Per aconseguir-ho, s'ha estudiat tant l'estructura completa de la llibreria PENELOPE, com les seues variables, per tal de dissenyar una estructura que les agrupara de forma eficient per a millorar, entre altres, els accessos a memòria. A més, aprofitant la reestructuració, s'ha dividit el codi en objectes independents o mòduls fàcilment extensibles.

Donat els nostres coneixements previs, la quantitat d'eines per desenvolupar en un model de programació OO i la popularitat del llenguatge, es va decidir traduir el codi original escrit en FORTRAN a C++. En primer lloc, es va desenvolupar una versió inicial consistent en una traducció el més literal possible, sense reestructuració en classes ni optimitzacions, per tal de verificar el correcte funcionament de les rutines traduïdes. Una vegada realitzada la primera verificació, es va procedir a reestructurar el codi de forma modular emprant classes i polimorfismes. A aquesta, es van afegir eines per a que la inclusió de nous components com *tallies*, geometries o fonts de partícules es pugui fer sense modificar el codi existent, aïllant completament els components individuals. Aquesta mecànica per estendre la funcionalitat del codi permet incloure nous mòduls sense tindre un coneixement global de la resta de l'estructura o components del codi, i evita introduir errors a altres zones del programa. Els mecanismes emprats estan descrits a l'article adjunt i, amb major detall, a la documentació inclosa

²<https://github.com/PenRed/PenRed>

³<https://archive.softwareheritage.org/swh:1:dir:87fd3a7e44d76653486135914430a87fd60e92ac/>

al paquet PenRed. Per a l'optimització del codi seqüencial, es van emprar eines com Valgrind [138] amb Callgrind [139] per identificar els punts crítics on s'inverteix la major quantitat del temps de còmput i centrar els esforços en aquests.

Respecte al paral·lelisme, en aquesta versió, s'ha implementat en dos nivells. D'una banda multifil per a execucions en memòria compartida, i d'altra multiprocés per a memòria distribuïda, emprant els fils estàndard de C++ i l'estàndard MPI respectivament. Aquesta estratègia permet utilitzar de forma eficient els recursos de la infraestructura on s'execute PenRed, com s'ha vist a la secció 4.2. A més, el paral·lelisme s'ha estructurat per a que els futurs components que s'incloguen a PenRed siguin automàticament paral·lels. Per tant, usuaris amb necessitats específiques poden desenvolupar els seus propis components, com *tallies* o geometries, sense haver de preocupar-se per la complexitat i problemes de la programació paral·lela, que s'han discutit a la secció 4.2.

Una vegada desenvolupada la primera versió modular, optimitzada i paral·lela de PenRed, s'ha procedit a fer una verificació exhaustiva per assegurar que es reproduïen completament els resultats del paquet PENELOPE original. En primer lloc, s'ha verificat que les rutines de mostreig de les seccions eficaces de cadascuna de les interaccions implementades reproduïen exactament els mateixos resultats. A més, s'han comparat tots els exemples distribuïts al paquet PENELOPE, obtenint resultats estadísticament compatibles a tots els casos. Finalment, com s'ha mencionat, es pretén donar especial atenció a aplicacions mèdiques, motiu pel qual s'ha implementat suport per a processar i simular directament imatges mèdiques en format DICOM [140] a través de la llibreria DCMTK [141]. Aquesta característica s'ha verificat reproduint un exemple del paquet GATE [142], on es calculen els mapes de deposició de dosi a partir d'una imatge DICOM.

Respecte a l'eficiència del programa, s'ha comparat l'escalabilitat de PenRed front als programes principals distribuïts en PENELOPE i PenEasy amb diferents proves. En primer lloc, s'ha intentat comparar el comportament i eficiència dels programes principals emprant "únicament" el transport de fotons, electrons i positrons per separat, minimitzant així la contribució de la geometria i altres components. Per aconseguir-ho, s'ha creat una geometria el més simple possible, consistent en un pla que separa l'espai en dues regions, una de buit i un altra d'aigua. D'altra banda, la font s'ha configurat per a que les partícules incidisquen de forma perpendicular al pla des de la zona de buit. El motiu de minimitzar l'efecte de la geometria i altres components opcionals, és que el transport de les partícules és un component comú per a qualsevol simulació, mentre que el tipus de geometria, la seua complexitat, l'ús de comptadors, i altres característiques són específiques del problema. A més, s'ha elegit aigua com a material perquè és el que típicament s'empra a les cal·libracions mèdiques,

com ja s'ha vist als treballs previs. Per últim, s'ha realitzat la mateixa comprovació, però emprant un dels exemples del paquet PENELOPE on la geometria sí té un pes significatiu en el temps de còmput total.

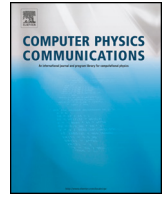
Finalment, s'ha avaluat la millora de la velocitat de PenRed emprant múltiples fils, mesurant el *speed-up* per a execucions en diferents màquines i amb diferent nombre de fils. Les mesures s'han executat per als mateixos casos que en la comparació entre PenRed, PenEasy i PENELOPE.

4.4 Resultats

El procés de verificació mostra que els resultats obtinguts amb PenRed són perfectament compatibles amb els del programa principal proporcionat al paquet PENELOPE. D'altra banda, tot i que els resultats poden dependre de la configuració de les simulacions, PenRed ha mostrat ser més eficient que els seus anàlegs PenEasy i PENELOPE, especialment quan s'empra paral·lisme per accelerar l'execució. De fet, a les proves on s'han emprat tots els cors disponibles per a les execucions dels tres programes, s'ha mesurat que PenRed és un 44%, 11% i 9% més ràpid que el PENELOPE original en les proves de transport de fotons, electrons i positrons, respectivament. D'altra banda, al cas de l'exemple complet, s'ha registrat una millora d'un 15%. A més, els resultats són encara més favorables al comparar amb PenEasy, i es poden trobar a les figures 9, 10 i 11 de l'article adjunt. Cal remarcar que les diferències de temps de còmput augmenten conforme s'incrementa el nombre de cors emprats, el que demostra que PenRed escala millor en memòria compartida i, per tant, aprofita els recursos disponibles en infraestructures altament paral·leles de forma més eficient. De fet, s'ha comprovat també que el comportament del *speed-up* a PenRed és lineal amb el nombre de cors físics emprats, i millora substancialment la velocitat quan s'explota el *hyperthreading* a processadors que suporten aquesta tecnologia.

Com a treball futur es pretén continuar amb el desenvolupament de PenRed per optimitzar zones crítiques del programa i la implementació del paral·lisme. A més, una vegada ja s'ha comprovat el correcte funcionament d'aquest, es preten aprofitar la reestructuració, ja completada, per adaptar el codi a maquinari específic com GPGPUs i FPGAs.

4.5 Article



PenRed: An extensible and parallel Monte-Carlo framework for radiation transport based on PENELOPE ☆, ☆☆



V. Giménez-Alventosa^{a,*}, V. Giménez Gómez^{b,*}, S. Oliver^c

^a Instituto de Instrumentación para Imagen Molecular (I3M), Centro mixto CSIC - Universitat Politècnica de València, Camí de Vera s/n, 46022, València, Spain

^b Departament de Física Teòrica and IFIC, Universitat de València-CSIC, Dr. Moliner, 50, 46100, Burjassot, València, Spain

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

ARTICLE INFO

Article history:

Received 17 November 2020

Received in revised form 21 December 2020

Accepted 31 May 2021

Available online 18 June 2021

Keywords:

Radiation transport

Monte Carlo simulation

Electron-photon showers

Parallel computing

MPI

Medical physics

ABSTRACT

Monte Carlo methods provide detailed and accurate results for radiation transport simulations. Unfortunately, the high computational cost of these methods limits its usage in real-time applications. Moreover, existing computer codes do not provide a methodology for adapting these kinds of simulations to specific problems without advanced knowledge of the corresponding code system, and this restricts their applicability. To help solve these current limitations, we present PenRed, a general-purpose, stand-alone, extensible and modular framework code based on PENELOPE for parallel Monte Carlo simulations of electron-photon transport through matter. It has been implemented in C++ programming language and takes advantage of modern object-oriented technologies. In addition, PenRed offers the capability to read and process DICOM images as well as to construct and simulate image-based voxelized geometries, so as to facilitate its usage in medical applications. Our framework has been successfully verified against the original PENELOPE Fortran code. Furthermore, the implemented parallelism has been tested showing a significant improvement in the simulation time without any loss in precision of results.

Program summary

Program title: PenRed: Parallel Engine for Radiation Energy Deposition.

CPC Library link to program files: <https://doi.org/10.17632/rkw6tvtngy.1>

Licensing provision: GNU Affero General Public License (AGPL).

Programming language: C++ standard 2011.

Nature of problem: Monte Carlo simulations usually require a huge amount of computation time to achieve low statistical uncertainties. In addition, many applications necessitate particular characteristics or the extraction of specific quantities from the simulation. However, most available Monte Carlo codes do not provide an efficient parallel and truly modular structure which allows users to easily customise their code to suit their needs without an in-depth knowledge of the code system.

Solution method: PenRed is a fully parallel, modular and customizable framework for Monte Carlo simulations of the passage of radiation through matter. It is based on the PENELOPE [1] code system, from which inherits its unique physics models and tracking algorithms for charged particles. PenRed has been coded in C++ following an object-oriented programming paradigm restricted to the C++11 standard. Our engine implements parallelism via a double approach: on the one hand, by using standard C++ threads for shared memory, improving the access and usage of the memory, and, on the other hand, via the MPI standard for distributed memory infrastructures. Notice that both kinds of parallelism can be combined together in the same simulation. Moreover, both threads and MPI processes, can be balanced using the builtin load balance system (RUPER-LB [30]) to maximise the performance on heterogeneous infrastructures. In addition, PenRed provides a modular structure with methods designed to easily extend its functionality. Thus, users can create their own independent modules to adapt our engine to their needs without changing the original modules. Furthermore, user extensions will take advantage of the builtin parallelism without any extra effort or knowledge of parallel programming.

☆ The review of this paper was arranged by Prof. Stephan Fritzsche.

☆☆ This paper and its associated computer program are available via the Computer Physics Communications homepage on ScienceDirect (<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00104655>).

* Corresponding authors.

E-mail addresses: vicent.gimenez@i3m.upv.es (V. Giménez-Alventosa), vicente.gimenez@uv.es (V. Giménez Gómez), sanolgi@upvnet.upv.es (S. Oliver).

Additional comments including restrictions and unusual features: PenRed has been compiled in linux systems with g++ of GCC versions 4.8.5, 7.3.1, 8.3.1 and 9; clang version 3.4.2 and intel C++ compiler (icc) version 19.0.5.281. Since it is a C++11-standard compliant code, PenRed should be able to compile with any compiler with C++11 support. In addition, if the code is compiled without MPI support, it does not require any non standard library. To enable MPI capabilities, the user needs to install whatever available MPI implementation, such as openMPI [24] or mpich [25], which can be found in the repositories of any linux distribution. Finally, to provide DICOM processing support, PenRed can be optionally compiled using the dicom toolkit (dcmtk) [32] library. Thus, PenRed has only two optional dependencies, an MPI implementation and the dcmtk library.

© 2021 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Monte-Carlo (MC) methods are widely used in most scientific applications which involve radiation transport simulations, including electron microscopy and microanalysis, x-ray fluorescence, detector characterisation, radiation metrology, dosimetry and radiotherapy, among others.

MC are statistically based methods that, among many other applications, can be used to resolve radiation transport problems by random sampling. Detailed chronological MC simulations yield the same results as the solution of the linear Boltzmann transport equation, within statistical error bars. Thus, the Type A uncertainties associated to MC simulations are strongly dependent on the number of sampled particle histories. On the other hand, Type B uncertainties may occur because of the usage of variance reduction techniques, such as condensed-history algorithms, particle splitting etc. Moreover, the Type A uncertainties strongly depend on the complexity of the system geometry, and the distance to the source, due to the decreasing of particle fluence, and other configuration parameters. However, even if the statistical uncertainties can be reduced by increasing the number of histories and the calculation time, they decrease only as $1/\sqrt{N}$ [1], which means that, for instance, it is required statistics 100 times larger to reduce the uncertainty by a factor of 10. Usually, particle transport codes based on MC methods scale their execution time linearly with the number of histories, therefore, in the previous example, the calculation time will be increased by a factor of 100.

Another point to take into account in MC simulation codes is their usage field. The huge amount of possible applications and configurations of the simulation system (energy ranges, geometries, particle types and physics models, etc.) make difficult, if not impossible, to cover all options on a single MC code system. As a consequence, there exist different MC code system packages as EGS [2], MCNP [3], PENELOPE [4], GEANT IV [5] or FLUKA [6] and many adaptations for specific applications. Among them, PENELOPE stands out for its accurate implementation of electron and positron electromagnetic physics, has an open source license and its source code is relatively simple compared with other MC codes. Furthermore, several previous works have parallelized PENELOPE to deal with the long execution times [7], some of them focused on medical applications using MPI parallelism [8] or GPU acceleration [9]. Some works also use simplifications to accelerate the simulations for specific purposes [10].

However, the existent parallelizations and optimizations of the PENELOPE code have some disadvantages, such as loss of generality, and, for instance, limited applicability beyond its specific purpose, or low capability for running efficiently on heterogeneous architectures. These limitations will be discussed in detail in section 2.

The present work is aimed to provide a general purpose, highly parallel, efficient and flexible MC simulation framework, called PenRed (Parallel ENgine for Radiation Energy Deposition). It contains a restructured object oriented (OO) C++ translation of the

original PENELOPE library to provide a modular, parallel and easily extensible code system. PenRed is distributed as a free and open source program and can be downloaded from its repository.^{1,2}

The rest of the paper is organized as follows. In Section 2, a brief revision of the state of the art is presented, and the advantages of PenRed versus already existing PENELOPE based codes are discussed. A description of both the translation and restructuring of the code, the PenRed capability to be easily customised, as well as its parallelism model and implementation are discussed in Section 3. In Section 4, the validation of our code is described in detail. Section 5, contains a comparison of the performance of parallel executions among PenRed, PENELOPE and PenEasy. In addition, it includes a study of the PenRed behaviour on parallel executions. Finally, current research and future plans of development are described in Section 6.

2. State of the art

Our revision of the state of the art of the optimisation of PENELOPE is based on the study of the works [7–10].

There are some works that optimised the code for a specific application, targeting to increase speed but compromising its range of application. One of these works is the DPM code [10], which uses some approximations of the particle transport description and the underlying physics models, for instance, simplified cross sections, to reduce the simulation run-time. The disadvantage of this approach is that it is accurate only for low atomic numbers and in a specific energy range, typically the one used in conventional radiotherapy treatments. Because of its high efficiency, other works have been focused on the optimisation of DPM, some using Message Passing Interface (MPI) [11], and others vectorizing the code [12], or adapting it to Graphics Processing Units (GPU) [13][14].

On the other hand, [8] presents an MPI version of PENELOPE. Although authors are focused on medical applications, and the tests performed belong to this field, the code should run generic simulations using the PENELOPE library. The code has been applied to perform simulations of photon beams using a method for treating intracranial lesions. However, this work does not provide a multithreading implementation, which could take advantage of sharing resources and reduce the memory usage. In addition, a modular and extensible structure based on OO programming is unavailable.

Let us turn now to the GPU acceleration of PENELOPE. In [9] the authors develop with the CUDA programming model (NVIDIA Corporation, Santa Clara, CA), a MC simulation code which runs entirely on a GPU using the photon interaction model of the PENELOPE code. Their approach focuses on the simulation of x-ray transport, thus neither electron nor positron transport is considered. Through the simulation of voxel based geometries, and sim-

¹ <https://github.com/PenRed/PenRed>.

² <https://archive.softwareheritage.org/swh:1:dir:87fd3a7e44d76653486135914430a87fd60e92ac/>.

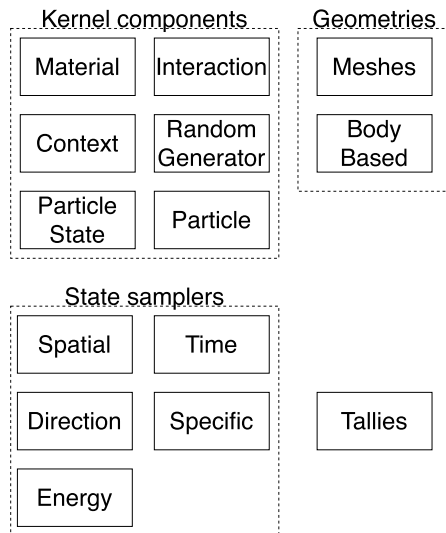


Fig. 1. Classification of the PenRed modules.

plifications such as the usage of single precision operations, the authors achieve a speed one order of magnitude faster than the CPU version. Although their GPU computing is very efficient for their purpose, it is limited to specific applications. A similar approach is used by [15], which develops a GPU-accelerated MC dose calculation platform based on PENELOPE focused on commissioning of IMRT. Moreover, the authors ensure that their approach should be applicable to nearly any application requiring high dose accuracy.

Finally, [7] presents a package of Linux scripts for the parallelization of MC simulations with PENELOPE. Just as [8], this work uses PENELOPE with no approximations or limitations. However the same disadvantages apply to this study. Furthermore, these works do not provide mechanisms to take full advantage of heterogeneous systems, where some kind of load balancing is required.

In addition to optimisation based works, PenEasy [16] was developed as an easy and modular main program for PENELOPE. However, the former has not implemented any parallelism nor takes advantage of advanced OO modular programming.

A further shortcoming of most of the previous studies is that they use an outdated version of the PENELOPE library. An exception is PenEasy, which is updated frequently to use the latest PENELOPE version.

3. Material and methods

PenRed has been organised using modules providing abstract template classes as interfaces to facilitate their customisation. These components, or modules, are shown in Fig. 1, where PENELOPE whole library, including its geometry package, is implemented. A detailed description of each component and the implementation of the corresponding derived classes can be found in the PenRed documentation, which is distributed with the PenRed package. Briefly, `kernel components` handle all the physics related tasks, the module `geometries` take care of particle transport across the geometry system, `state samplers` determine the initial state of the particle and, finally, `tallies` extracts information from the simulation loop.

Moreover, PenRed provides a main program, `pen_main`, to facilitate the usage of the package. In order to utilize it, the user only needs to specify the configuration of the simulation without coding anything.

3.1. C++ translation

The complete PENELOPE source code has been translated by hand to C++ and restructured using an OO approach to achieve a highly modular and extensible system. To this aim, some other codes with OO implementations make an intensive use of virtual methods. However, the recourse to virtual tables to perform calls to virtual methods involves a non negligible overhead [17], specially on methods which are called continuously during the particle transport. To achieve a compromise between flexibility and performance, PenRed employs template abstract classes as interfaces which allows to use final derived classes on kernel components instead of a pointer to the abstract base class, avoiding the requirement to perform virtual calls in most cases. Of course, custom derived classes created by the user are intended to follow the same mechanism. During the code restructuring, an analysis to identify and optimise the most critical sections of the source code has been carried out. This analysis has been performed for all the examples included in the PENELOPE package, using the Valgrind [18] software with the Callgrind tool [19], which provides a detailed information about the number of instructions required by each class, function and line of code on a simulated hardware. We found that, as expected, the most time-consuming functions for both languages (C++ and Fortran) are the particle simulation loops, and, within them, the *JUMP*, *STEP* and *KNOCK* subroutines. Furthermore, these three functions together represent about 80 – 90% of the simulation loop time in the profiled examples. As a consequence, several optimisations have been made specially in these functions, such as grouping specific variables and arrays into structures and structure arrays, respectively, to improve memory access.

3.2. Extension capabilities

As mentioned above, PenRed uses template abstract classes as interfaces to extend the code functionality by creating a derived class of the corresponding module. The method to extend a module is explained in the documentation. However, in this section we will focus only on the most useful for a standard user, namely, `state samplers`, `geometries` and `tallies`.

3.2.1. State samplers

There are many `state samplers` types, as shown in Fig. 1. Among them, the `spatial`, `time`, `direction` and `energy` sampler types take care of determining the initial particle position, time of flight, direction and energy, respectively. These groups of samplers are named generic samplers, because they can be used for any particle regardless of the particle type. On the other hand, specific samplers can change the whole particle state but they are particle specific. They have been used, for example, to sample the Stokes parameters of polarised photons.

This approach facilitates the creation of new samplers, since they can be coded as small classes using only two mandatory methods, the configuration and the sampling method itself. In addition, any sampler type can be combined with any other type, allowing creating complex state sampling configurations from simple parts.

Finally, new samplers can be easily added to the framework and they will be automatically accessible from the provided main program, without changing the code outside the new custom sampler class. The only required change is to add the corresponding source file names into two include files. Further details can be found in the PenRed documentation.

3.2.2. Geometries

As shown in Fig. 1, `geometries` are classified into two main types, `meshes` and `body based geometries`. Although new geometry types can be created directly from the base abstract class, in

order to facilitate the coding PenRed provides two specific interfaces to create geometries based on meshes and geometries based on bodies or geometric objects. At present, PenRed implements an optimised translation of the original PENELOPE geometry library as a body based geometry, and additionally, a voxelized geometry, from which the PenRed DICOM geometry has been created as a mesh based one. The voxelized geometry transport is based both on the penEasy voxelized transport [16] and the PENELOPE penCT program [20].

Using these intermediate interfaces, the creation of new geometries requires, mainly, the definition of the configuration and the *STEP* and *LOCATE* methods, i.e. the implementation of the geometry itself without taking care of framework details. The *STEP* and *LOCATE* methods handle, respectively, the transport of a particle across the geometry, and the localisation of a particle inside the geometry.

Regarding how to incorporate new geometries into PenRed and how to use them with the provided main program, the methodology is analogous to the one used by state samplers (see section 3.2.1).

3.2.3. Tallies

PenRed implements several tallies, most of them adapted from the main program of the original PENELOPE package. All of these are extensively described in the PenRed documentation. The capability to extend this component, i.e. to create new tallies, is, probably, the most valuable feature for a standard user. As other components, tallies are implemented via derived classes. However, to provide a generic interface that does not constrain the tally creation, their interface contains a number of virtual functions that will be called by the main program at different locations in the simulation loop. Notice that only the functions directly related to the information to be extracted by the tally, need to be implemented. Fig. 2 shows a simplified flow diagram where the tally functions (yellow boxes) are called at different points of the main loop. A complete description of the data registered by each function and when are called in the simulation loop can be found in the documentation. Again, the method to incorporate new tallies to the framework is the same as for samplers and geometries.

3.2.4. Overhead

To be able to avoid any recoding new implementations of the components described above, PenRed uses virtual calls. As discussed before, these calls could produce a non negligible run-time overhead. However, since the sampler process is usually executed once per history, the performance overhead generated by samplers is truly negligible. Moreover, the only virtual calls carried out by the geometry class are the *STEP* and the *LOCATE* functions. Although these two methods are called in every loop, they are only called at most once. In addition, they are generally computationally expensive, so the virtual call overhead is usually negligible as compared to the total function execution cost. Unfortunately, tally functions are called several times along the simulation loop, leading to a non negligible time overhead. In fact, we observe in some of the PENELOPE examples that up to 5% of the total execution time has been wasted in virtual calls.

Obviously, the number of virtual calls due to tally functions increases with the number of tallies invoked. Therefore, to reduce their footprint on critical applications, one solution is to create a wrapper tally containing many other tallies. With this approach only one virtual call per used function will be performed by the wrapper tally, while the wrapped tally functions can be called invoking the final class without accessing to the virtual table.

Note that most examples included in the PENELOPE package use a very simple geometry. As the complexity of the geometry grows, the influence of the *STEP* function on the execution time

grows too, minimising the relative weight of the virtual call overhead.

3.3. Parallelism

To take advantage of both, multi-core processor architectures and distributed infrastructures, PenRed implements parallelism at both levels, i.e. multithreading and multiprocessing. Notice that both parallelisms are optional and can be separately enabled or disabled during compilation. However, parallel coding is not a trivial task and may produce several outcomes that block our program (deadlocks), hide bugs, as race conditions, or effects that slow the whole program, like the false sharing effect [21]. Nevertheless, two undesirable approaches to combine high parallelism and extensibility are to limit the capability to extend the code according to the knowledge of the user on parallel programming or limit the parallelism itself. Instead, PenRed uses another approach consisting of providing a high grain parallelism completely transparent to the user. In this way, the user can write their modules like sequential code without worrying about parallelism and they will be able to be executed on multithreading and multiprocess runs.

To achieve this goal, specially on multithreading executions, PenRed limits the member functions that can change the state of the corresponding class. For example, geometry *STEP* and *LOCATE* member functions are defined as constant, so that they cannot change the state of the class, ensuring that the state of the geometry remains constant once initialised until the end of the simulation. An alternative approach could be to duplicate the whole simulation (geometry, samplers, etc.) However, this approach generates a huge amount of duplicated memory, increasing its consume, and avoids threads to share memory at cache level, increasing the memory fails [22].

The only module that requires a special, but quite simple, treatment to be simulated on parallel executions are the tallies. As PenRed cannot know how to add the partial results of a specific tally, a corresponding sum function must be implemented. This function gets an object of the same tally type as argument and it is supposed to sum both contributions and store the result on the object that calls the function. Thus, the only requirement consists of specifying how to sum the tally individual results. Other aspects as when the sum function is called or the order to reduce the results, are handled automatically by PenRed. The implemented tallies follow the guidelines described in the PENELOPE manual [4] to calculate the uncertainties of the scored magnitudes. That is, on sequential executions, the scored contributions of each history to a magnitude q and its square q^2 are added to independent counters. Therefore, the estimators Q and Q^2 of the magnitude and its square can be obtained as,

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad \bar{Q}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 \quad (1)$$

where N is the number of independent histories and i indicates the history number. Then, the corresponding standard deviation is calculated as,

$$\sigma_Q = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\bar{Q}^2 - \bar{Q}^2 \right] \quad (2)$$

On the other hand, in multithreading executions, each thread uses independent sets of counters to sum the contributions of each history (q_{ji}, q_{ji}^2) , where i denotes the history index of thread j . Using these counters, the final estimators are,

$$\bar{Q} = \frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_{th}} \sum_{i=1}^{N_j} q_{ji} \quad \bar{Q}^2 = \frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_{th}} \sum_{i=1}^{N_j} q_{ji}^2 \quad (3)$$

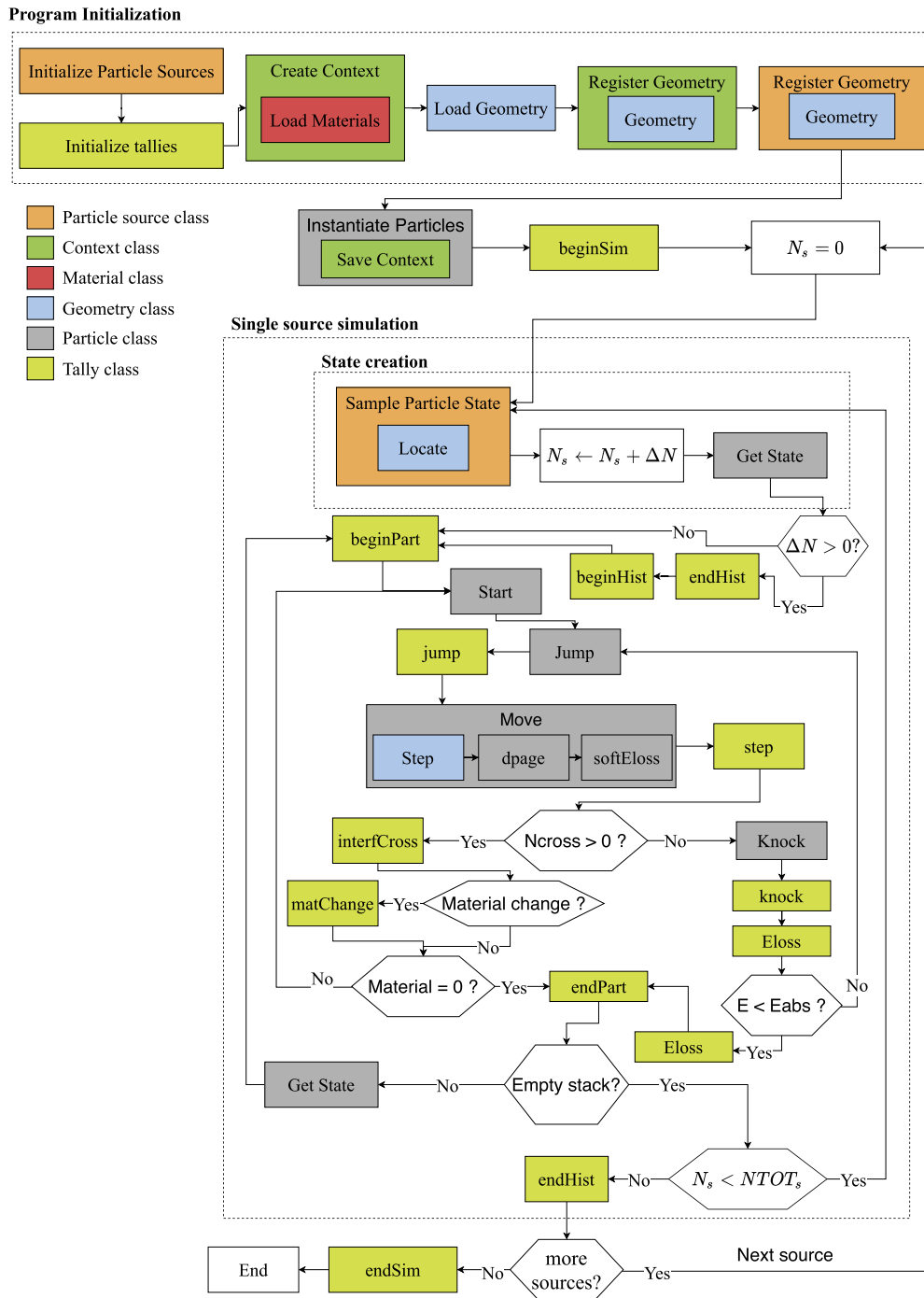


Fig. 2. Basic flow diagram of the PenRed main program including tally calls. (For interpretation of the colours in the figure(s), the reader is referred to the web version of this article.)

where N_t is the total number of histories performed by all threads, N_{th} is the number of threads, and N_j is the number of histories simulated by the thread number j . At the end of the simulation, the partial results of all threads are summed and the average and standard deviation are calculated using eq. (3) and eq. (2), with $N = N_t$. The same methodology is used for multiprocessing and combined multithreading and multiprocessing executions.

A very important issue to take into account on parallel executions is that we must ensure that each thread uses an independent succession of random numbers. Otherwise, different threads may produce correlated results. Since PenRed uses the same random number generator as the original PENELOPE code system, devel-

oped by F. James [23], independent sequences of random numbers are achieved using the seeds calculated by [7]. These are automatically assigned by the PenRed main program to each thread on each process to avoid correlated results.

Concerning the libraries employed in PenRed for parallelism, multithreading has been implemented using the standard threads of C++11. Thus, it is not necessary any additional external library. On the other hand, multiprocessing has been implemented via the MPI standard, hence any library that implements that standard, such as OpenMPI [24] or MPICH2 [25], can be used to run PenRed with MPI enabled.

Finally, it is important to notice that most modern distributed infrastructures are heterogeneous, i.e. each node has different capabilities, such as different processors, amount of memory, disk throughput and IOPS etc. Even if the system is homogeneous, the usage of an infrastructure by many users could produce a non negligible overhead. For example, modern cloud computing infrastructures suffer unpredictable capability fluctuations [26–29]. To take full advantage of distributed infrastructures, PenRed incorporates a load balance system named RUPER-LB [30] which automatically handles the assignation of histories to each thread in each process. Similarly to multithreading and MPI features, the load balance system can be enabled or disabled during the compilation process.

3.4. DICOMs

As can be seen from most of the works reviewed in section 2, medical applications are a field of interest that requires huge optimisations for PENELOPE users. This is the reason why PenRed implements a special type of mesh based geometry to be able to perform simulations directly based on DICOM (Digital Imaging and Communications in Medicine) [31] images.

To offer support for this image format, PenRed uses the open-source library DICOM ToolKit (DCMTK) to extract all the required data from DICOM files. This library can be found in some linux repositories or github [32]. As other features, DICOM support is optional, allowing to use PenRed without that library and its dependencies.

Currently, PenRed's DICOM module converts a CT or US DICOM image to a voxel geometry. To transform CT Hounsfield Units (HU) to density, the DICOM module requires a CT calibration curve to be provided by the user. Then, the material assignation could be done using the contours included in DICOM files or both by HU or density ranges. This approach allows users to perform the segmentation of CT images according to the guidelines of the TG-186 [33]. On the other hand, US images require contour information to carry out the material and density assignations.

4. Validation

In this section, a collection of tests designed to verify the functionality of the PenRed framework are presented. The tests consist of a comparison between PENELOPE and PenRed of the sampling of the cross sections for all the interactions included in the original PENELOPE Fortran code. In addition, all the results of the examples distributed in the Penelope package are reproduced with and without parallelism. Finally, to validate the processing of voxel/DICOM geometries, a comparison with a GATE [34] DICOM simulation example is carried out.

For the sake of brevity, the results of the MPI tests will not be described here because their conclusions and figures are completely equivalent to those obtained from the multi-threading analysis (see section 4.3). Moreover, since MPI processes communicate with each other only in the post-processing step, and its contribution to the total simulation time is completely negligible on distributed memory infrastructures, it is useless to discuss a scalability analysis of MPI executions. In fact, the scalability, in simulations with negligible tally sum processing time, is determined by the slowest process and it is approximately "perfect" on a homogeneous cluster.

Most of the implemented features for quadric geometries can be validated by performing the simulations of all the PENELOPE examples. To reproduce our results, the user can find all the examples with the corresponding materials, geometries and configuration files, in the directory `examples` of the PenRed distribution package.

As for the verification of voxel/DICOM geometries, basic tests consist of converting quadric geometries to voxel geometries and carrying out the very same simulation on both geometry types. The conversion can be performed through the PenRed provided utility `geo2voxel`, which transforms any geometry into a voxelised one by means of the *LOCATE* method. The output file contains a voxel geometry ready to be simulated. We have verified that the results from quadric and voxel geometries are perfectly compatible within statistical error bars. For the purpose of brevity, we will not discuss the results of these tests here. Our results however can be easily reproduced by the user using the tools provided in the package distribution. Instead, a more complete test consisting of a simulation on a DICOM image, is presented in section 4.4.

To run the tests, we used a single node with two Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2660 v3 @ 2.60 GHz processors, 8 TB of disk storage and 125 GB of memory RAM. Each of these processors had 10 physical cores with hyperthreading, i.e. a total of 20 physical and 40 logical threads. The PenRed modules and the `pen_main` program were compiled using the `g++` GNU C++ Compiler version 7.3.1 [35], on a Centos 7.0 Linux operating system.

4.1. Cross-section sampling tests

To check the interaction sampling methods, all the differential cross sections (DCS) of each physics model implemented in PENELOPE have been sampled with PENELOPE and PenRed and their results compared. Notice that these tests employ the physics routines as isolated components, i.e. no other components such as the geometry package, tallies or a main program have been used. These tests have been repeated for different materials and energies. The conclusion is that all the sampled differential cross sections for each material, energy and interaction for both codes match exactly. These results ensure that the restructured physics modules implemented in PenRed are perfectly compatible with those of the original Fortran code.

Fig. 3 displays comparisons between the results from PENELOPE and PenRed for the Compton energy differential cross section for scattered photons sampled for aluminium (upper left graph) and gold (upper right graph) with incident photons of 500 and 50 keV, respectively, and for the partial wave model DCS for elastic scattering of electrons by aluminium (lower left graph) and positrons by gold (lower right graph) with incident energies set to 100 keV for electrons and 1 MeV for positrons. As can be seen, the cross sections from PenRed are almost identical to those from PENELOPE.

4.2. PENELOPE example tests

In order to validate PenRed, the simulation results from all the setups of the examples included in the PENELOPE Fortran package were reproduced. These tests were done using a single thread. The comparison between PENELOPE and PenRed was carried out first by plotting all output files for the corresponding tallies, and second, to ensure that these codes were statistically compatible, by a bin-by-bin analysis of the histograms of the differences. Notice that the particle tracks generated by PENELOPE and PenRed follow in general different paths, in spite of the fact that both the random generator and initial seeds were the same. The reason is twofold: on the one hand, the differences in the main program structure, such as the use in PenRed of independent stacks for each particle type, and on the other hand, the different round-off errors that occur in the calculation of intersections of particle trajectories with material interfaces. We have verified that the results from PENELOPE and PenRed are perfectly equivalent in all the cases studied and that the differences are usually less than the data statistical uncertainties.

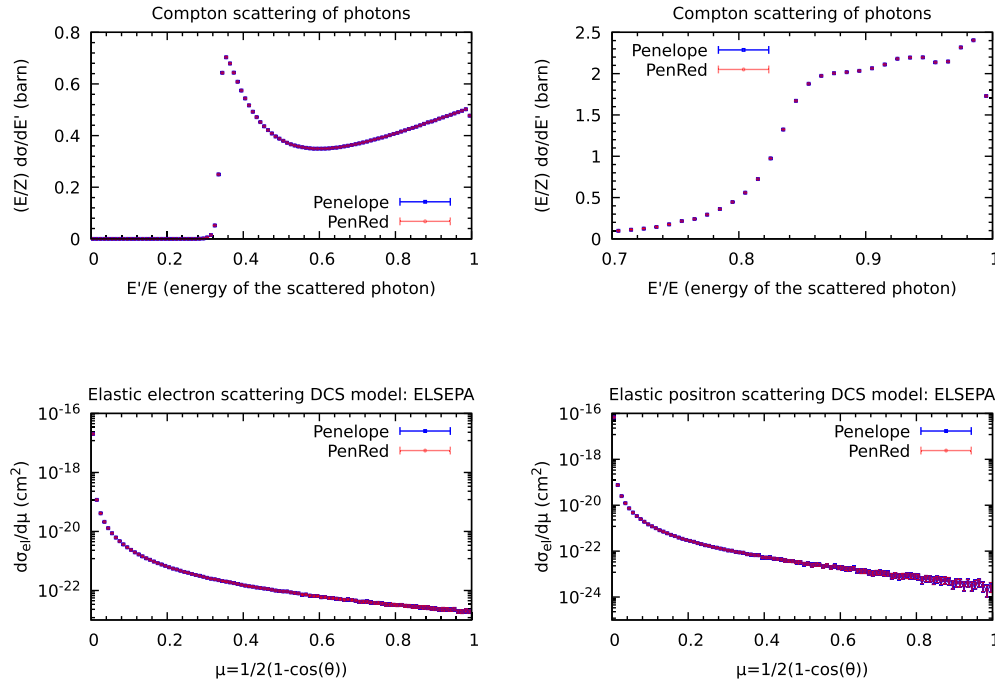


Fig. 3. Simulation results for the Compton energy differential cross section for scattered photons by aluminium ($Z = 13$) with an incident photon energy of 500 keV (upper left graph) and by gold ($Z = 79$) with an incident energy of 50 keV (upper right graph), and for the partial wave model DCS for elastic scattering of electrons by aluminium (lower left graph) and positrons by gold (lower right graph), with energies of 100 keV and 1 MeV, respectively. Error bars enclosure a deviation of 2σ .

For the sake of clarity and easy of reading, only the results for the example `1-disc-vr` will be presented. Its setup consists of a homogeneous copper cylinder whose radius and height can be set by the user in the geometry file `disc.geo`. The source is a point-like gun that produces a uniform conical beam of electrons with initial energy 40 keV in the direction of the Z axis and a narrow semi-aperture of 5 degrees, as specified in the input file `disc.in`. The electrons impact on the cylinder from below. This example has two variants: with and without variance reduction (VR) techniques. The results of the former will be presented below so as to check the PenRed implementation of VR methods. Interaction forcing techniques used in this example increase both the electron bremsstrahlung emission and hard inelastic collision probabilities by a factor of 2000 and 200, respectively. In addition, a splitting factor of 2 on bremsstrahlung and x-ray produced photons was applied. The simulation parameters were $E_{abs} = 1$ keV, $C_1 = C_2 = 0.05$ and $W_{cc} = W_{cr} = 1$ keV. The cylinder itself is defined as an energy-deposition, impact and angular detector. The `pen_main` program was run for about 10.9 hours to generate 8×10^6 histories, which corresponds to a simulation speed of about 204 histories per second. Fig. 4 displays a comparison between the results from PENELOPE and PenRed of the electron energy distribution of fluence integrated over the detector volume.

In addition, Fig. 5 displays another relevant quantity simulated in this example, namely the probability energy distribution of downbound electrons, i.e. those that escape from the material system in the negative Z direction.

As can be seen from Figs. 4 and 5, the results from PENELOPE and PenRed are perfectly compatible within statistical error bars. Moreover, the results are bin-by-bin equivalent with differences that are smaller than statistical errors.

4.3. Multi-threading tests

In this section, the validation of the multi-threading operation of PenRed is discussed. The same tests with the same simulation parameters, computer setup and compiler options as those done in

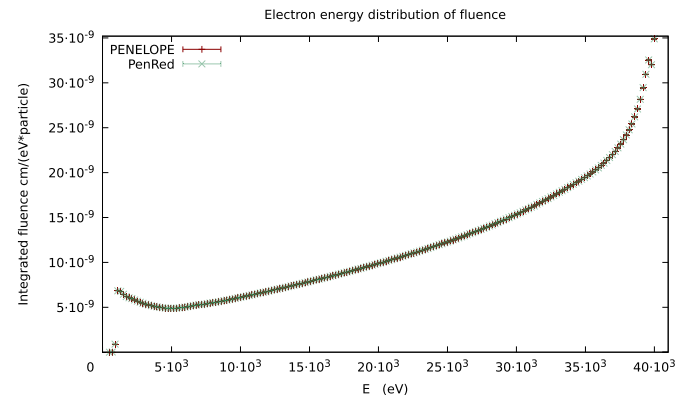


Fig. 4. Simulation results of the electron fluence energy distribution integrated over the detector volume of example `1-disc` with variance reduction techniques. The red (dark) colour represents results from the original PENELOPE code, while green (light) points are the results from PenRed. Some transparency to PenRed points is applied because both curves overlap. Error bars enclosure a deviation of 2σ .

section 4.2, were carried out by running the PenRed `pen_main` program on a single thread and on 5 threads so as to compare the results. The data of each pair of the corresponding output files was compared bin by bin against each other. Fig. 6 shows results of the energy deposition spectrum for the PENELOPE example `3-detector`.

The material system of this example consists of a cylindrical NaI scintillator detector with thin Fe backing. A point-like $Co-60$ gamma-ray source emits a photon pencil beam in the $-Z$ direction with equiprobable energies 1.17 and 1.33 MeV. The photons impinge on the NaI crystal from above. No VR is applied in this example.

All comparisons carried out showed that the results from a single thread and multiple thread simulations are statistically compatible. Therefore, we can ensure that our multi-threading program works properly. In order to reproduce our results, the user only

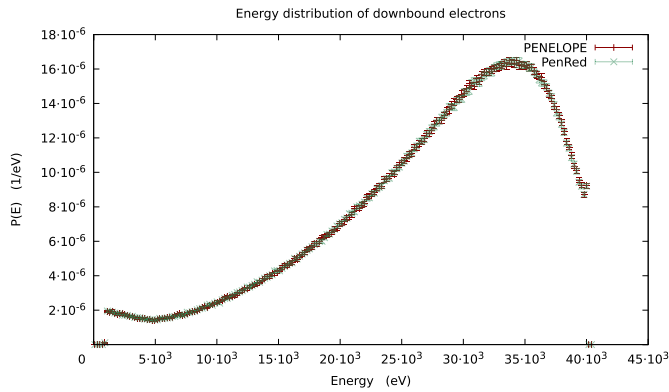


Fig. 5. Downbound probability energy distribution for electrons simulated in the example 1-disc using VR techniques. The red (dark) colour represents results from the original PENELOPE code simulations, while green (light) dots are the results from PenRed. For the sake of clarity, some transparency to PenRed points is applied because both curves overlap. Error bars enclosure a deviation of 2σ .

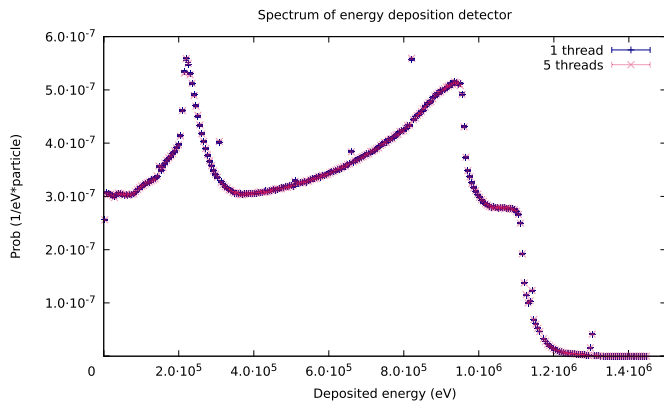


Fig. 6. Energy deposition spectrum in a Na scintillator simulation (example 3-detector). The colour blue (dark) represents results from single thread simulations, while purple (light) dots are the results from runs on 5 threads. For the sake of clarity, some transparency to the points corresponding to the runs on 5 threads is applied because both curves overlap. Error bars enclosure a deviation of 2σ .

needs to change the parameter *nthreads* in the provided input configuration files of any of the examples.

4.4. DICOM tests

In order to validate the PenRed DICOM capabilities, a GATE [34] internal targeted radionuclide therapy (TRT) example has been reproduced.³

It consists of a treatment in which ^{90}Y radionuclides are administered to a patient to irradiate a liver injury. The material and density information is extracted from a patient CT image, while its associated emitting source spatial distribution is provided as a voxelized source generated using a patient SPECT activity map. Since the GATE example uses the MHD format for input images, a Python script using ITK [36] has been implemented to convert the images to the DICOM format, which can be directly processed by PenRed.

A voxel-wise comparison between the results from PenRed and Gate has been carried out following the methodology described in [15]. In this work, the statistical variable z-score is defined as follows,

$$z(\vec{r}) = \frac{D^{\text{PenRed}}(\vec{r}) - D^{\text{GATE}}(\vec{r})}{D^{\text{GATE}}(\vec{r}) \times \sigma_{\text{tot}}} \quad (4)$$

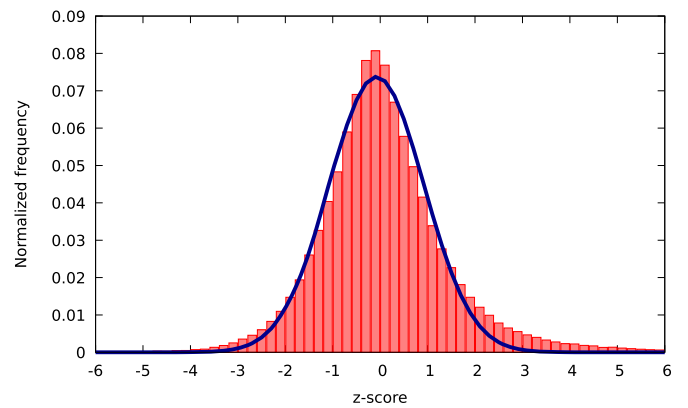


Fig. 7. Frequency histogram of z-score values for voxels with a registered dose of, at least, 0.1% of the maximum deposition. The dark line represents a Gaussian fit to the histogram with mean $\mu = -0.078$ and $\sigma = 1.002$.

where $D^{\text{PenRed}}(\vec{r})$ and $D^{\text{GATE}}(\vec{r})$ are the absorbed doses at voxel \vec{r} calculated by PenRed and GATE, respectively, and σ_{tot} is the standard deviation of the distribution $(D^{\text{PenRed}}(\vec{r}) - D^{\text{GATE}}(\vec{r})) / D^{\text{GATE}}(\vec{r})$. The resulting z-scores are compared to a standard normal distribution in the form of a normalised frequency histogram, which directly indicates the distribution of dose differences spanning all voxels.

As many voxels present a zero or zero compatible energy deposition, by taking them into account would produce a wide distribution with a spike centred at zero, which would hide the discrepancies from voxels with a significant contribution to the total deposited dose. For this reason, the comparison has been made by considering only the voxels with a registered deposited dose of, at least, 0.1% of the maximum deposition. As the source is distributed throughout the body of the patient, it includes all the regions of interest.

The results for the frequency distribution of z-scores compared to a Gaussian distribution are displayed in Fig. 7. They indicate that the z-score distribution is close to a normal one with a mean near zero ($\mu = -0.078$) and a standard deviation of approximately 1 ($\sigma = 1.002$). However, some non statistical differences can also be observed between both distributions. These discrepancies could be due to the variations between Gate and PenRed in the implementation of the physics models, transport algorithms and the material database. Indeed, discrepancies between different Monte Carlo codes have been reported in the literature, specially when electron transport is involved [37], [38], [39], [40].

Finally, Fig. 8 shows the dose distributions for two Z planes generated by PenRed (left) and GATE (right). As can be seen, they agree well within expected statistical and systematic uncertainties. This conclusion is also valid for all planes. Therefore, considering the differences between Gate and PenRed implementations mentioned above, the comparison of dose distributions together with the z-score frequency histogram, indicate that PenRed is capable to properly process DICOM images and extended voxelized sources.

5. Results

In this section, the parallel capabilities of PenRed are discussed and tested. Firstly, a comparison of the scalability of PenRed in multi-threaded executions with both the PENELOPE main program and the PenEasy code is performed. Secondly, the behaviour of PenRed speed-up is studied. Finally, in order to maximise the efficiency of the simulations with PenRed, a performance test is carried out by using two different compilers.

³ <https://davidarrut.pages.in2p3.fr/gate-exercices-site/docs/exercice5/>.

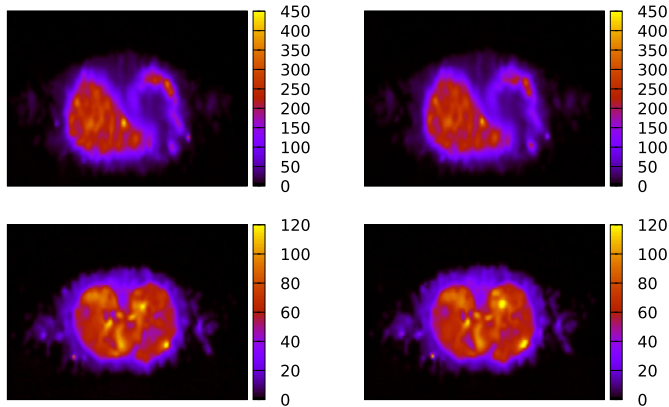


Fig. 8. Dose distribution in eV/g per history for the TRT example discussed in the text on the z -planes 127 (top) and 156 (bottom). The left panels correspond to results obtained by PenRed, while the right ones have been generated with GATE.

5.1. Scalability comparison

As discussed in section 3.3, the communication among threads or processes is only required at the end of the simulation and represents a negligible amount of time. Thus, MPI executions on different nodes, i.e. running on distributed memory architectures, show a perfect scalability. However, in shared memory parallel executions, the different threads or processes compete for the same resources, which affects the simulation speed-up and scalability. Therefore, in this section we will study the efficiency of parallel simulations running PenRed on a shared memory system.

In order to evaluate the scalability and performance of our implementation, a comparison between PenRed and the 2019 versions of the PENELOPE and PenEasy main programs has been carried out. As the simulation speed depends strongly on specific characteristics such as geometry or the tallies used, we will first compare the capabilities of the different main programs involving only the kernel components that are common to every simulation. To avoid the performance overhead of using specific configurations, such as tallies or complex geometry characteristics, a very simple geometry is simulated. It consists of a single plane dividing the space into two parts, a void and a water region. The source is a monoenergetic point-like one located in the void region and the emitted beam is directed towards the water region perpendicularly to the plane.

Moreover, to isolate as much as possible the kernel components, we perform three different tests using the configuration above. In the first one, the source emits electrons with energy 40 keV and absorption energies of 1 keV for electrons and “infinite” for photons, i.e. the tracking of photons is disabled. In the second test, photons of 1 MeV and absorption energy of 1 keV are emitted, while electron tracking is disabled. Finally, the third test has the same characteristics as the second one but electron tracking is enabled up to 100 keV.

To achieve parallelism with the three codes, two different approaches have been employed. In the case of PenRed, the builtin multithreading support has been utilised. However, for the PENELOPE and PenEasy main programs, a bash script to launch multiple processes in parallel has been used, as in [7].

All the simulations of the tests have been performed with the very same material and geometry files for the three main programs. In order to measure their capabilities to scale up, each simulation has been repeated with increasing number of processes, for PENELOPE and PenEasy, or threads, in the case of PenRed. Indeed, to scale the complexity of the execution, the total number of histories to be simulated has been scaled with the number of concurrent processes or threads. For example, if four processes are to

be executed, the total number of histories is four times the number of histories used for the single process test.

The tests have been run on a single node with an AMD Ryzen 7 2700 processor, 16 GB RAM and Fedora 30 as OS. This processor has 8 physical cores with a total of 16 logic threads. The two FORTRAN codes have been compiled with the GNU Fortran (GCC) version 9.3.1, while PenRed has been compiled with the gcc C++ version 9.3.1. All codes have been compiled with the `-O2` and `-march=native` optimisation flags.

The test results are shown in Figs. 9 and 10. The former displays the total execution time as a function of the number of processes or threads. The latter presents the same quantity but relative to PenRed execution times. As can be seen, these results suggest that the PenRed implementation of kernel components is more efficient, specially on photon transport. Furthermore, in all tests PenRed provides a better scalability when the number of processes/threads is greater than the number of physical cores. Moreover, in this region, the execution times of the Fortran codes increase with respect to those of PenRed.

To complete the scalability comparison study, a test based on the variant without VR of the PENELOPE example described in section 4, `1-disc-novr`, has been carried out. However, being an example of the PENELOPE package, the PenEasy main program does not implement all the involved tallies, which should slightly affect the total execution time. On the contrary, PenRed implements all the required tallies. Notice that the choice of a non VR version of the example is due to the fact that PenEasy and PENELOPE main programs implement different types of VR.

This last test has been run on the same node used for the code validation (see section 4), which consists of two processors with a total of 40 logical threads. In this case, the number of simulation processes or threads has been increased by a factor of 5 in each iteration. The resulting simulation times are shown in Fig. 11, where differences of up to 15% between PenRed and both, Pene-lope and PenEasy main programs, can be noted. Furthermore, the behaviour observed in this test is analogous to that of the previous tests, namely PenRed takes the lead in execution time as the number of threads increases exceeding the number of physical cores.

Thus, the suitability of using a multithreading approach rather than multiprocess executions on shared memory architectures is demonstrated, specially on high parallel processors.

5.2. Speed-up behaviour

In this section, tests focus on the speed-up behaviour of the PenRed code are described. Instead of scaling the problem complexity with the number of threads, in this analysis the former remains constant as the latter increases. To measure the speed-up, the quantity S_n is used. It is defined as

$$S_n = \frac{time_1}{time_n} \quad (5)$$

where the subscript n indicates the number of threads, $time_1$ is the simulation time running a single thread and $time_n$ the execution time of the same simulation using n threads. Ideally, S_n should tend to the number of threads n , which is the maximum speed-up that can be achieved.

Firstly, the speed-up for the same three tests used in the scalability analysis has been measured. The results are shown in Fig. 12. In all cases, a linear speed-up has been obtained until the number of threads exceeds the number of physical cores. A linear fit to the speed-up data in this region gives a slope of about 0.86 for all three cases. After this point, logical threads share the available processor cores. As can be seen, the photon-only simulation shows a better speed-up than both, electron-only and combined simulations. Nevertheless, in all cases it is worth using all the processor

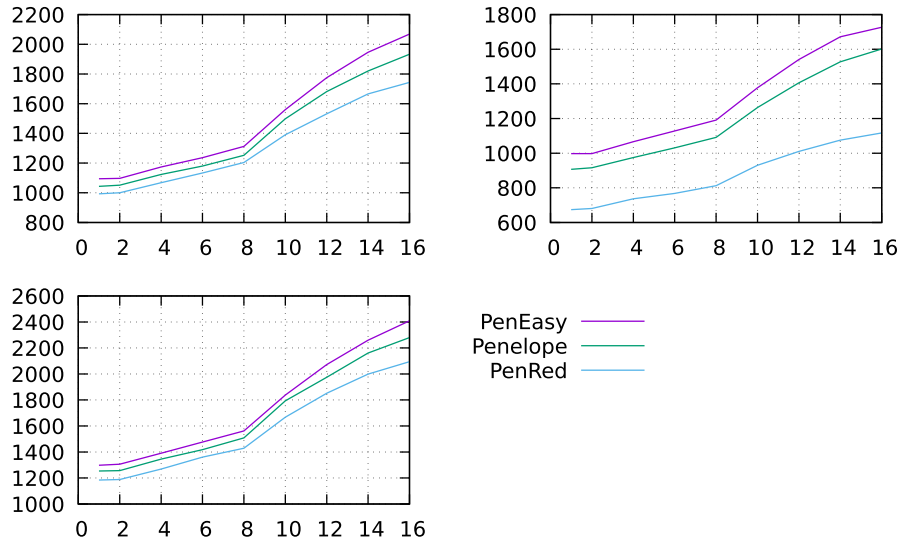


Fig. 9. Execution times in seconds for the electron-only (upper left), photon-only (upper right) and combined (lower left) simulation tests as a function of the number of processes/threads.

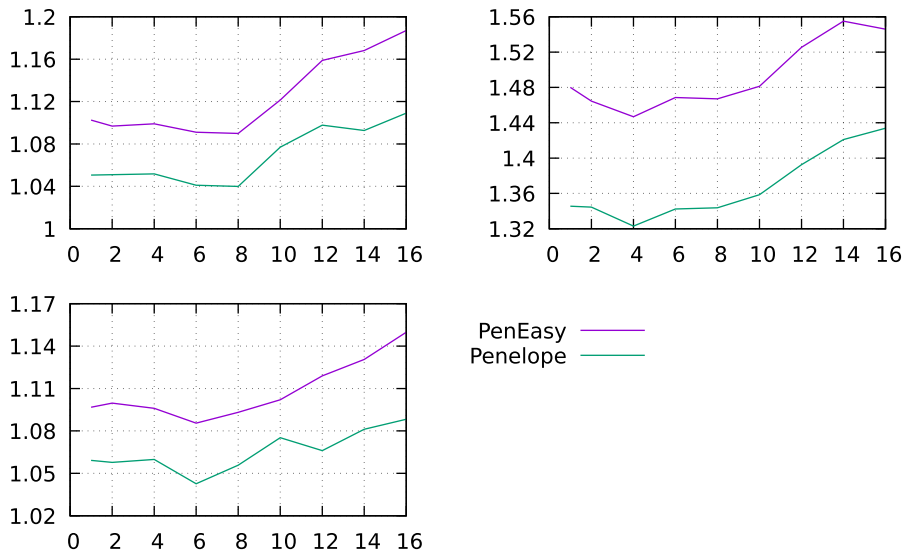


Fig. 10. Execution times relative to PenRed for the electron-only (upper left), photon-only (upper right) and combined (lower left) simulation tests as a function of the number of processes/threads.

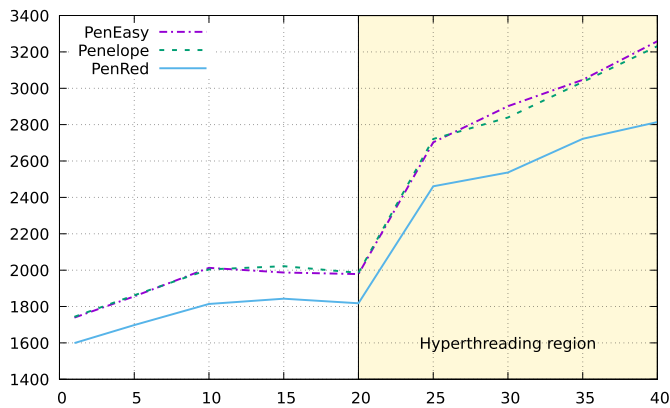


Fig. 11. Comparison of the execution times in seconds for the three codes as a function of the number of processes/threads used.

logical threads as the simulation time is reduced by 45%, 37% and

35% for the photon-only, electron-only and combined tests respectively, compared to the execution times with only 8 threads.

In addition, the speed-up of the same examples as in section 4.2 has been measured using the node with 40 logic threads. We found that all the tested examples show a similar speed-up behaviour. In Fig. 13, the values of S_n for the example 1-disc-novr as a function of the number of threads are presented. The green line represents a linear fit to the measured speed-up data when a maximum of one thread was executed on each physical processor core, corresponding to the zone between 1 and 20 threads. In this region, as discussed above, a linear correlation between the speed-up and the number of running threads was obtained. The value of the slope was 0.87. Again, it is worth using the full hyper-threading capabilities (40 threads) as a 28% reduction on the total simulation time compared to that obtained employing only 20 threads is achieved.

Thus, the speed-up tests described above demonstrate that PenRed is well suited for massively parallel infrastructures, as takes efficiently advantage of all the available resources.

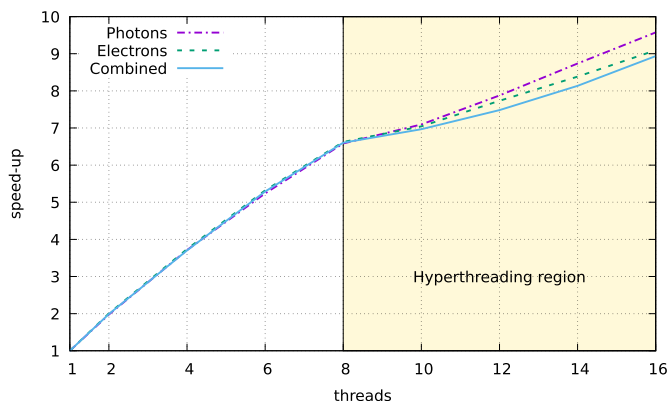


Fig. 12. PenRed speed-up values of the same tests as in the scalability analysis (Figs. 9 and 10). The figure is divided into two zones. The left one, from 1 to 8 threads, corresponds to executions with one thread per core. The right zone, from 9 to 16 threads, corresponds to the situation where threads share physical cores.

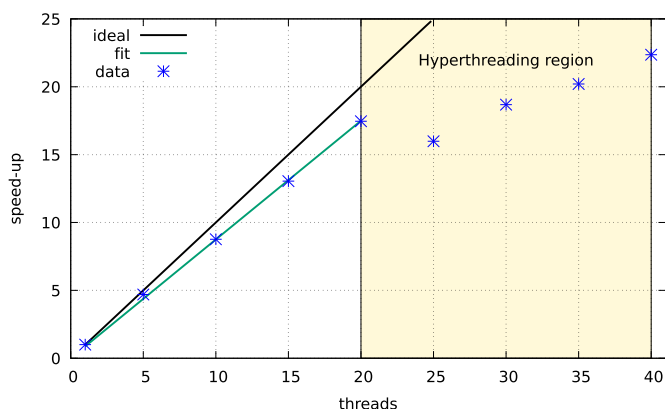


Fig. 13. Speed-up values of the PENELOPE example 1-disc-novr. The figure is divided into two zones. The left one, from 1 to 20 threads, corresponds to executions with no hyperthreading usage. The right zone, from 21 to 40 threads, corresponds to the hyperthreading region. The black line represents a perfect ideal speed-up while the green line is a linear fit to the speed-up data from 20 threads or less.

Table 1

Comparison between simulation speeds (histories/s) using the very same code compiled with GNU `g++` version 7.3.1 and Intel `icc` version 19.0.5.281. Both compilations were run on the same computer setup with a single thread. The first column specifies the example tested. The second and third columns contain the simulation speed in histories per second for the code compiled with `g++` and `icc`, respectively. Finally, the last column shows the increase in the simulation speed in percentage.

Example	GCC	icc	Increase (%)
1-disc-vr	$2.037 \cdot 10^2$	$3.039 \cdot 10^2$	49.16
3-detector	$2.623 \cdot 10^3$	$4.167 \cdot 10^3$	58.88
5-accelerator	$2.097 \cdot 10^2$	$3.194 \cdot 10^2$	52.31

5.3. Compiler tests

To maximise the program efficiency, the speed-up tests of all PENELOPE examples were repeated using the Intel C++ compiler [41] (`icc`) version 19.0.5.281 on the Intel processor node described in section 4. We found that the speed-up behaviour is very similar for both compilers. However, tests performed by running on a single thread show that the code compiled with `icc` is faster (by about 50–60%). These results are partially shown in Table 1, where the simulation speed of three PENELOPE examples is collected.

6. Conclusions and future work

PenRed provides a flexible, object-oriented, parallel and general purpose framework for Monte Carlo simulations of radiation transport in matter based on PENELOPE physics. As it has been verified, these features have been achieved without compromising simulation speed. Furthermore, the efficiency has been improved significantly. PenRed includes all the PENELOPE physics models. It has been thoroughly tested that PenRed reproduces the cross-sections of PENELOPE and that, within statistical errors, gives also the same results for the complete set of PENELOPE examples. Moreover, our results can be reproduced by the user using the input files provided in the PenRed package. In addition, our code system includes support to simulate voxel geometries and DICOM images, which make it suitable for performing Monte Carlo simulations of medical treatments.

Regarding parallelism, PenRed incorporates a mixed model for handling both distributed and shared memory parallelism via MPI and the standard C++ thread library, respectively. We have shown that PenRed achieves good speed-ups for both types of parallelism, which denotes that these features have been efficiently implemented. Furthermore, a builtin load balance system has been implemented to optimise executions on heterogeneous environments.

On the other hand, the modular structure of PenRed allows the developers to incorporate new custom components (particle sources, geometries, tallies, etc.) which can be included with no modification to the original PenRed code. The new components will be automatically usable in parallel computations without any previous knowledge of parallel programming.

In future versions of PenRed, we will implement new tallies and source models. In addition, we plan to improve the parallelism implementation to accelerate the execution time and adapt it to perform generic simulations on specific hardware accelerators, such as GPUs and FPGAs.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgements

The authors are deeply indebted to F. Salvat for many comments and suggestions, for clarifying many subtleties of the simulation algorithms of the transport of particles through matter, specially using PENELOPE, and for his patience and understanding. The work of V. Gimenez-Alventosa was supported by the program “Ayudas para la contratación de personal investigador en formación de carácter predoctoral, programa VALi+d” under grant number ACIF/2018/148 from the Conselleria d'Educació of the Generalitat Valenciana and the Fondo Social Europeo (FSE). V. Gimenez acknowledges partial support from FEDER/MCIyU-AEI under grant FPA2017-84543-P, by the Severo Ochoa Excellence Program under grant SEV-2014-0398 and by Generalitat Valenciana through the project PROMETEO/2019/087.

References

- [1] F. Salvat, PENELOPE-2018: a code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, OECD/NEA Data Bank, Issy-les-Moulineaux, France, 2019, available from <http://www.nea.fr/lists/penelope.html>.
- [2] EGSnrc: software tool to model radiation transport, <https://github.com/nrc-cnrc/EGSnrc>. (Accessed 2 July 2017).
- [3] Los Alamos Scientific Laboratory, Group X-6, MCNP: a General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport, Dept. of Energy, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, N.M., 1979.

- [4] F. Salvat, PENELOPE: a Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, OECD Nuclear Energy Agency, Issy-Les-Moulineaux, 2014.
- [5] S. Agostinelli, et al., GEANT4 Collaboration, Nucl. Instrum. Meth. A 506 (2003) 250–303, SLAC-PUB-9350, FERMILAB-PUB-03-339.
- [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] A. Badal, J. Sempau, Computer Physics Communications 175 (6) (2006) 440–450.
- [8] R. Cruise, R. Sheppard, V. Moskvina, Parallelization of the penelope Monte Carlo particle transport simulation package, 2003.
- [9] A. Badal, A. Badano, Medical Physics 36 (11) (2009) 4878–4880.
- [10] M. Rodríguez, J. Sempau, C. Bäumer, B. Timmermann, L. Brualla, Radiation Oncology (London, England) 13 (2018).
- [11] N. Tyagi, A. Bose, I.J. Chetty, Medical Physics 31 (9) (2004) 2721–2725, <https://aapm.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1118/1.1786691>.
- [12] X. Weng, Y. Yan, H. Shu, J. Wang, S.B. Jiang, L. Luo, Physics in Medicine and Biology 48 (7) (2003) N111–N120.
- [13] X. Jia, X. Gu, J. Sempau, D. Choi, A. Majumdar, S.B. Jiang, Physics in Medicine and Biology 55 (11) (2010) 3077–3086.
- [14] Y. Wang, T.R. Mazur, J.C. Park, D. Yang, S. Mutic, H.H. Li, Physics in Medicine and Biology 62 (12) (2017) 4970–4990.
- [15] Y. Wang, T.R. Mazur, O. Green, Y. Hu, H. Li, V. Rodriguez, H.O. Wooten, D. Yang, T. Zhao, S. Mutic, H.H. Li, Medical Physics 43 (7) (2016) 4040–4052.
- [16] J. Sempau, PENEASY: a structured main program from PENELOPE, freely available from <http://www.upc.es/inte/downloads/penEasy.htm> 2006, 2006, 06–01.
- [17] K. Driesen, U. Hölzle, in: Proceedings of the 11th ACM SIGPLAN Conference on Object-Oriented Programming, Systems, Languages, and Applications, OOPSLA '96, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 1996, pp. 306–323.
- [18] N. Nethercote, J. Seward, SIGPLAN Not. 42 (6) (2007) 89–100.
- [19] J. Weidendorfer, M. Kowarschik, C. Trinitis, in: M. Bubak, G.D. van Albada, P.M.A. Sloot, J. Dongarra (Eds.), Computational Science - ICCS 2004, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004, pp. 440–447.
- [20] F. Salvat, PENCT: a program for the simulation of electron-photon transport in voxelised structures using PENELOPE, private communication.
- [21] W.J. Bolosky, M.L. Scott, in: USENIX Systems on USENIX Experiences with Distributed and Multiprocessor Systems, vol. 4, Sedms'93, USENIX Association, Berkeley, CA, USA, 1993, p. 3.
- [22] H. Kwak, B. Lee, A.R. Hurson, Suk-Han Yoon, Woo-Jong Hahn, IEEE Transactions on Computers 48 (2) (1999) 176–184.
- [23] F. James, Comput. Phys. Commun. 60 (1990) 329–344.
- [24] R.L. Graham, T.S. Woodall, J.M. Squyres, in: R. Wyrzykowski, J. Dongarra, N. Meyer, J. Waśniewski (Eds.), Parallel Processing and Applied Mathematics, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006, pp. 228–239.
- [25] W. Gropp, in: Proceedings of the 9th European PVM/MPI Users' Group Meeting on Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2002, p. 7.
- [26] A. Iosup, N. Yigitbasi, D. Epema, in: 2011 11th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing, 2011, pp. 104–113.
- [27] P. Leitner, J. Cito, ACM Trans. Internet Technol. 16 (3) (2016).
- [28] J. Schad, J. Dittrich, J.-A. Quiané-Ruiz, Proc. VLDB Endow. 3 (1–2) (2010) 460–471.
- [29] S. Shankar, J.M. Acken, N.K. Sehgal, IETE Technical Review 35 (6) (2018) 656–660.
- [30] V.G. Alventosa, G.M. Martínez, J.D.S. Quilis, Ruper-lb: load balancing embarrassingly parallel applications in unpredictable cloud environments, <http://arxiv.org/abs/2005.06361>, 2020.
- [31] DICOM, <https://www.dicomstandard.org/>. (Accessed 28 September 2019).
- [32] DCMTK, <https://github.com/DCMTK/dcmktk>. (Accessed 28 September 2019).
- [33] F. Salvat, Åsa Carlsson Tedgren, Jean-François Carrier, Stephen D. Davis, Firas Mourtada, Mark J. Rivard, Rowan M. Thomson, Frank Verhaegen, Todd A. Wareing, Jeffrey F. Williamson, Med. Phys. (2012).
- [34] S. Jan, D. Benoit, E. Becheva, T. Carlier, F. Cassol, P. Descourt, T. Frisson, L. Grevillot, L. Guigues, L. Maigne, C. Morel, Y. Perrot, N. Rehfeld, D. Sarrut, D.R. Schaart, S. Stute, U. Pietrzyk, D. Visvikis, N. Zahra, I. Buvat GATE, Physics in Medicine and Biology 56 (4) (2011) 881–901.
- [35] GCC, <https://gcc.gnu.org/>. (Accessed 2 September 2019).
- [36] B. Lowekamp, D. Chen, L. Ibanez, D. Blezek, Frontiers in Neuroinformatics 7 (2013) 45.
- [37] J.P. Archambault, E. Mainegra-Hing, Physics in Medicine and Biology 60 (13) (2015) 4951–4962.
- [38] H. Uusijärvi, N. Chouin, P. Bernhardt, L. Ferrer, M. Bardiès, E. Forssell-Aronsson, Cancer Biotherapy and Radiopharmaceuticals 24 (4) (2009) 461–467.
- [39] J. Torres, M.J. Buades, J.F. Almansa, R. Guerrero, A.M. Lallena, Medical Physics 31 (2) (2004) 296–304.
- [40] F. Malano, F. Mattea, F.A. Geser, P. Pérez, D. Barraco, M. Santibáñez, R. Figueroa, M. Valente, Applied Radiation and Isotopes 151 (2019) 280–288.
- [41] Intel C++ compiler, <https://software.intel.com/en-us/cpp-compiler-developer-guide-and-reference-introducing-the-intel-c-compiler>. (Accessed 2 September 2019).

5 Conclusions

Com s'ha explicat a la secció 1, el treball desenvolupat al llarg de la tesi presentada es centra en emprar tècniques de Monte Carlo per obtenir, d'una banda, els resultats dosimètrics necessaris per a dur a terme tractaments tant de braquiteràpia com de radioteràpia externa, i d'altra, metodologies per a calcular aquests resultats. En aquesta línia, en primer lloc, al treball presentat a la secció 1 es proposa un mètode eficient per poder relacionar la dosi absorbida en aigua amb la dosi absorbida en teixit en les regions d'interès de càlculs dosimètrics en tractaments de braquiteràpia. Per aconseguir-ho, s'estudien i calculen una sèrie de factors correctors basats en les variacions de fluència energètica. Alhora, al propi estudi es posa de manifest la necessitat d'emprar aquests tipus de factors correctors, donat que, de no emprar-se, s'obtenen discrepàncies de fins a un factor 3.5 entre la dosi calculada en aigua i en os. La importància d'aquests factors radica en la variació de la fluència energètica en els diferents medis, especialment en aquells teixits amb Z altes en comparació a l'aigua, com és el cas de l'os. D'altra banda, tot i que en teixits adiposos les diferències són menudes, la seua contribució no és menyspreable a tots els casos, pel que compensa emprar els factors presentats. Respecte a la seua utilitat en clínica, les correccions proporcionades poden implementar-se en qualsevol sistema de planificació de tractament (SPT) i, a més, són fàcilment extensibles a altres distàncies, fonts i teixits seguint la metodologia descrita al treball.

Continuant amb els càlculs dosimètrics, els dos treballs següents s'han centrat en el càlcul de factors correctors per a la caracterització de cambres d'ionització emprades en diferents tipus de tractaments. El primer, presentat a la secció 2 i que discutirem a continuació, es centra en tractaments de braquiteràpia, mentre que el segon, corresponent a la secció 3, s'aplica a tractaments amb feixos externs de fotons amb energies de l'ordre del MV.

Començant al cas de braquiteràpia, al treball s'empren tècniques de Monte Carlo per a calcular els factors correctors necessaris per a mesurar la dosi absorbida mitjançant cambres d'ionització emprant dos aplicadors, el "Valencia" i el "large field Valencia". El primer s'emprava a la clínica en el moment de publicació del treball, mentre que l'estudi del segon va contribuir a la seua caracterització per a ser incorporat en un futur a l'ús clínic. La cambra elegida per a aquest estudi és la PTW34013, donat que és una cambra d'ionització típicament emprada a aquest tipus de tractaments i aplicadors. Per tant, el treball es centra en l'obtenció dels factors pertorbatius correctors, junt als desplaçaments dels punts efectius de mesura, necessaris per a mesurar correctament la dosi dipositada emprant la PTW34013 junt als dos aplicadors mencionats. Per a aconseguir-ho, s'han emprat i comparat tres mètodes diferents per a obtindre dites correccions. El Mètode *II* ha demostrat ser efectiu per a ambdós aplicadors, corregint

la dosi absorbida en el volum actiu de la cambra amb una incertesa dintre del 0.1%. Aquest consisteix en determinar tant el factor parcial corrector pertorbatiu com el desplaçament del punt efectiu per a cada aplicador. En canvi, el Mètode *I*, empra un factor global de correcció pertorbatiu independent de la profunditat i sense desplaçament del punt efectiu de mesura, però produeix diferències de fins un 1% per a l'aplicador "Valencia". Per corregir-ho, s'ha modificat el mètode emprant un factor corrector pertorbatiu global depenent de la profunditat (Mètode *Ib*), aconseguint així mantindre el punt efectiu de mesura recomanat amb diferències dintre del 0.1%.

Als resultats s'ha comprovat que els factors de correcció depenen tant de la cambra d'ionització com de l'aplicador emprat, el que posa de manifest la importància d'efectuar un estudi de Monte Carlo detallat abans de realitzar mesures de dosi emprant aquest tipus d'aplicadors. La metodologia presentada es pot estendre a altres tipus de cambres i aplicadors d'ús en braquiteràpia, pel que el treball té una repercussió directa en l'aplicació clínica.

Passant al cas de l'estudi de les correccions per a dosimetria de feixos, al treball corresponent s'han calculat els valors de correcció de qualitat del feix per a huit cambres d'ionització combinades amb feixos de fotons des de 4 fins a 24 MV. Aquest càlcul s'han reproduït, en paral·lel, junt a altres grups independents amb l'objectiu d'incorporar dades de cambres d'ionització no incloses al TRS 398 original i reduir la incertesa de les dades presentades, la qual era d'un 1%. Emprant simulacions de MC amb el codi PENELOPE/PenEasy s'han simulat els correctors factors amb una incertesa menor del 0.25%, quedant per sota de l'1% mencionat. En tots els casos, els resultats presentats estan en concordança amb els obtinguts per la resta de grups de treball participants en l'actualització del TRS 398. En referència a les dades, els valors k_Q per a les cambres considerades són menors que els proporcionats pel protocol original. No obstant, aquest comportament ha sigut reproduït per la resta de grups. La importància d'aquest treball és, per tant, la contribució a l'actualització del TRS 398, del qual, les dades i els formalismes descrits s'empenen en tractaments clínics a nivell mundial.

Degut als nivells d'incertesa tan baixos requerits als protocols internacionals, els treballs presentats fins ara han requerit una estadística molt alta, el que es tradueix en un gran cost computacional i temps d'execució llargs. A més, algunes simulacions han requerit adaptar el codi a les nostres necessitats, ja que, com és d'esperar, hi ha casos específics que no es contemplan als programes proporcionats. Més encara, podent adaptar fàcilment el codi a les nostres necessitats, es podria accelerar el temps de càlcul de forma significativa. Aquestes raons són les que han motivat l'últim treball d'aquesta tesi, el desenvolupament d'un codi Monte Carlo optimitzat i flexible,

que empre de forma eficient els recursos computacionals disponibles alhora que l'usuari pugui, fàcilment, estendre la seua funcionalitat. Amb aquest objectiu el treball descrit a la secció 4 presenta el codi PenRed, el qual proporciona un entorn de treball flexible, orientat a objectes, paral·lel i de propòsit general basat en la física de PENELOPE.

En primer lloc, s'ha demostrat que PenRed reproduïx, interacció a interacció, el mostreig de totes les seccions eficaces del codi PENELOPE original. Així mateix, s'han reproduït els resultats de tots els exemples proporcionats al paquet PENELOPE. Per tant, s'ha realitzat una verificació exhaustiva del correcte funcionament de PenRed. Més encara, s'ha comprovat el correcte funcionament en el processat i simulació d'imatges mèdiques en format DICOM front al codi GATE. En segon lloc, PenRed ha demostrat emprar de forma eficient els recursos disponibles al maquinari, ja siga executant-se de forma seqüencial o paral·lela, a nivell tant de memòria distribuïda com compartida. A més proporciona una estructura modular i mecanismes senzills per estendre la seua funcionalitat. Més encara, PenRed s'encarrega automàticament del paral·lelisme dels mòduls, pel que l'usuari pot incorporar mòduls nous al codi, sense coneixements previs de computació paral·lela, i que aquests funcionen en execucions paral·leles.

Per tant, les aportacions en conjunt de la tesi són, la millora de càlculs dosimètrics en tractaments de braquiteràpia, a partir del protocol del TG-43, la caracterització dels aplicadors "Valencia" i "large field Valencia" i la definició d'una metodologia clara per a aquest tipus de càlcul, la participació en l'actualització i inclusió de noves dades al protocol internacional TRS 398, i, finalment, la creació d'un nou codi de simulació altament paral·lel, eficient i flexible.

En conclusió, el conjunt de treballs presentats a aquest document aporten una contribució significativa al desenvolupament de mètodes de càlculs de magnituds i correccions dosimètriques d'ús clínic en tractaments tant de braquiteràpia com de radiació externa. No sols això, sinó que a més, contribueix en termes d'eficiència i flexibilitat en la millora de les eines existents per a realitzar aquest tipus de càlculs mitjançant tècniques de Monte Carlo. Com a treball futur, continuant en aquesta línia d'investigació, s'estudiaran mètodes per a millorar les planificacions de tractaments oncològics que involucren radiació realitzant les simulacions amb PenRed, permetent així optimitzar el codi per a aquest tipus de càlculs. A més, ja actualment, s'està treballant en la millora del paral·lelisme implementat a PenRed i en una futura adaptació a maquinari específic, com GPGPUs i FPGAs.

Agraïments

En primer lloc, agrair als meus directors, Javier i Facundo, el seu recolzament i atenció durant el desenvolupament de la tesi, més encara tenint en compte la trajectòria sinuosa que he seguit. Gràcies al seu esforç i guia, aquesta tesi s'ha pogut dur a bon port. Agrair sobretot la seua paciència i comprensió amb mi, i esperem que puguem continuar col·laborant en el futur. A més, agraiïsc a tota la gent amb la que he col·laborat, directa i indirectament, per a dur a terme els diferents treballs que formen aquesta tesi i d'altres que igualment m'han aportat experiència i coneixement.

Finalment, però no menys important, agrair a la meua família per haver respectat i recolzat sempre les meues decisions, sovint inusuals i polèmiques. Durant el transcurs d'aquesta tesi sempre han estat al meu costat per aconsellar-me. Vull agrair de manera especial a Sandra, per la seua alegria, comprensió i col·laboració en el dia a dia.

Continuarà...

Apèndix A

Codis

```
1
2 #include<cstdio>
3 #include<cstdlib>
4 #include<thread>
5 #include<chrono>
6 #include<vector>
7
8 void prod(double* result ,
9          const double* vector ,
10         const double* matrix ,
11         const unsigned long n){
12
13     for(unsigned long i = 0; i < n; ++i){
14         double sum = 0.0;
15         for(unsigned long j = 0; j < n; ++j)
16             sum += vector[j]*matrix[i*n+j];
17         result[i] = sum;
18     }
19 }
20
21
22 void threadProd(double* result ,
23               const double* vector ,
24               const double* matrix ,
25               const unsigned long n ,
26               const unsigned long vStart ,
27               const unsigned long nVect2proc){
28
29     unsigned long vInit = vStart*n;
30     for(unsigned i = 0; i < nVect2proc; ++i){
31         unsigned long vPos = vInit+i*n;
32         prod(&result[vPos],&vector[vPos],matrix,n);
33     }
34 }
35 }
36
```

```

37 int main(int argc, char** argv){
38
39     //Comprovació de paràmetres d'entrada
40     if(argc != 3){
41         printf("usage: %s n threads\n", argv[0]);
42         return 0;
43     }
44
45     //Extraguem els paràmetres
46     const unsigned long n = static_cast<unsigned long>(atol(argv
47     [1]));
48     const unsigned long nn = n*n;
49
50     const unsigned nthreads = static_cast<unsigned>(atoi(argv[2])
51     );
52     printf("Processant el producte matriu vector amb n=%lu i %u
53     fils\n",
54     n, nthreads);
55
56     //Inicialització de generador de nombres aleatoris
57     std::srand(346);
58
59     //Generació de la matriu
60     double* matrix = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
61     nn));
62
63     for(unsigned long i = 0; i < nn; ++i)
64         matrix[i] = static_cast<double>(std::rand());
65
66     //Generació dels vectors
67     const unsigned long nvect = 1000;
68     const unsigned long nvectElements = nvect*n;
69     double* vectors = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
70     nvectElements));
71     for(unsigned long i = 0; i < nvectElements; ++i)
72         vectors[i] = static_cast<double>(std::rand());
73
74     //Reserva de memòria per als resultats
75     double* results = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
76     nvectElements));
77
78     std::vector<std::thread> threads;
79     const unsigned vectPerThread = nvect/nthreads;
80
81     //Prenem la primera mesura de temps
82     std::chrono::steady_clock::time_point begin = std::chrono::
83     steady_clock::now();
84
85     for(unsigned i = 0; i < nthreads; ++i){
86         //Creem el thread "i"
87         threads.push_back(std::thread(threadProd,

```

```

82         results ,
83         vectors ,
84         matrix ,
85         n ,
86         i*vectPerThread ,
87         vectPerThread));
88
89         //Li assignem afinitat a la CPU "i"
90         cpu_set_t cpuset;
91         CPU_ZERO(&cpuset);
92         CPU_SET(i, &cpuset);
93         int rc = pthread_setaffinity_np(threads[i].native_handle(),
94             sizeof(cpu_set_t), &cpuset);
95         if(rc != 0){
96             printf(" Unable to set affinity for thread %d\n",i);
97         }
98         else{
99             printf(" Affinity for thread %d set to CPU %d\n",i,i);
100        }
101    }
102 }
103
104 //Esperem que tots els threads acaben
105 for(unsigned i = 0; i < nthreads; ++i)
106     threads[i].join();
107
108 //Mesurem el temps final
109 std::chrono::steady_clock::time_point end = std::chrono::
110     steady_clock::now();
111
112 //Calculem i mostrem el temps d'execució
113 long int duration =
114     std::chrono::duration_cast<std::chrono::milliseconds>(end -
115     begin).count();
116
117 printf("Temps de còmput: %ld ms\n",duration);
118
119 //Escrivim els resultats
120 /*
121 for(unsigned i = 0; i < nthreads; ++i){
122     unsigned long vInit = i*vectPerThread*n;
123     char filename[20];
124     sprintf(filename, "th-%u", i);
125     FILE* fout = fopen(filename, "w");
126     for(unsigned j = 0; j < vectPerThread; ++j){
127         unsigned long eInit = vInit+j*n;
128         for(unsigned long element = 0; element < n; ++element)
129             fprintf(fout, "%12.4E ", results[eInit+element]);
130         fprintf(fout, "\n");
131     }
132     fclose(fout);
133 }

```

```

132 */
133 return 0;
134 }

```

Codi A.1: Codi del producte matriu vector multifil

```

1
2 #include <cstdio>
3 #include <cstdlib>
4 #include <thread>
5 #include <chrono>
6 #include <vector>
7 #include <mpi.h>
8
9 void prod(double* result ,
10          const double* vector ,
11          const double* matrix ,
12          const unsigned long n){
13
14     for(unsigned long i = 0; i < n; ++i){
15         double sum = 0.0;
16         for(unsigned long j = 0; j < n; ++j)
17             sum += vector[j]*matrix[i*n+j];
18         result[i] = sum;
19     }
20
21 }
22
23 void threadProd(double* result ,
24                const double* vector ,
25                const double* matrix ,
26                const unsigned long n ,
27                const unsigned long vStart ,
28                const unsigned long nVect2proc){
29
30     unsigned long vInit = vStart*n;
31     for(unsigned i = 0; i < nVect2proc; ++i){
32         unsigned long vPos = vInit+i*n;
33         prod(&result[i*n],&vector[vPos] , matrix , n);
34     }
35 }
36
37 int main(int argc , char** argv){
38
39     //Comprovació de paràmetres d'entrada
40     if(argc != 2){
41         printf("usage: %s n\n" , argv[0]);
42         return 0;
43     }
44
45     //Extraguem els paràmetres
46     const unsigned long n = static_cast<unsigned long>(atol(argv
47     [1]));

```

```

47  const unsigned long  mn = n*n;
48
49  //Inicialització de generador de nombres aleatoris
50  std::srand(346);
51
52  //Generació de la matriu
53  double* matrix = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
54      mn));
55
56  for(unsigned long i = 0; i < mn; ++i)
57      matrix[i] = static_cast<double>(std::rand());
58
59  //Generació dels vectors
60  const unsigned long  nvect = 1000;
61  const unsigned long  nvectElements = nvect*n;
62  double* vectors = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
63      nvectElements));
64
65  for(unsigned long i = 0; i < nvectElements; ++i)
66      vectors[i] = static_cast<double>(std::rand());
67
68  //Inicialitzem el MPI
69  MPI_Init(NULL, NULL);
70  int size;
71  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
72  int rank;
73  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
74
75  printf("Processant el producte matriu vector amb n=%lu i %u
76      processos\n",
77      n, size);
78
79  const unsigned  vectPerRank = nvect/size;
80
81  //Reserva de memòria per als resultats d'aquest procés
82  double* results = static_cast<double*>(malloc(sizeof(double)*
83      vectPerRank*n));
84
85  //Sincronitzem els diferents processos MPI
86  MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
87
88  //Prenem la primera mesura de temps
89  std::chrono::steady_clock::time_point begin = std::chrono::
90      steady_clock::now();
91
92  //Executem el còmput d'aquest rang
93  threadProd(results, vectors, matrix, n, rank*vectPerRank,
94      vectPerRank);
95
96  //Sincronitzem els diferents processos MPI
97  MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
98
99  if(rank == 0){

```

```

93     //Mesurem el temps final
94     std::chrono::steady_clock::time_point end = std::chrono::
steady_clock::now();
95
96     //Calculem i mostrem el temps d'execució
97     long int duration =
98         std::chrono::duration_cast<std::chrono::milliseconds>(end
- begin).count();
99
100    printf("Temps de còmput: %ld ms\n",duration);
101    }
102
103    //Finalitzem el MPI
104    MPI_Finalize();
105
106    //Escrivim els resultats
107    /*
108    char filename[20];
109    sprintf(filename,"rank-%d",rank);
110    FILE* fout = fopen(filename,"w");
111    for(unsigned j = 0; j < vectPerRank; ++j){
112        unsigned long eInit = j*n;
113        for(unsigned long element = 0; element < n; ++element)
114            fprintf(fout,"%12.4E ",results[eInit+element]);
115        fprintf(fout,"\n");
116    }
117    fclose(fout);
118    */
119    return 0;
120 }

```

Codi A.2: Codi del producte matriu vector MPI

Bibliografía

- [1] E. B. Podgorsak, Radiation Oncology Physics: A handbook for teachers and students, IAEA Library Cataloguing in Publication Data, 2005 (2005).
- [2] Sociedad Española de Física Médica (SEFM), Fundamentos de Física Médica, ADI, 2013 (2013).
- [3] N. Ravinder et al, Dosimetry of interstitial brachytherapy sources: recommendations of the AAPM radiation therapy committee task group no 43, Med. Phys. 22 (1995) 209–34 (1995). doi:10.1118/1.597458.
- [4] P. Andreo et al., Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy: an International Code of Practice for Dosimetry Based on Standards of Absorbed Dose to Water , IAEA Technical Reports Series 398, https://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/TRS398_scr.pdf (2000).
- [5] F. H. Attix, Energy imparted, energy transferred and net energy transferred, Physics in Medicine and Biology 28 (12) (1983) 1385–1390 (1983). doi:10.1088/0031-9155/28/12/003.
- [6] A. Nahum, Cavity theory, stopping-power ratios, correction factors, Clinical Dosimetry Measurements in Radiotherapy (Medical Physics, Madison), <https://www.aapm.org/meetings/09SS/documents/03Nahum-CavityTheorywithCorrections.pdf> (2009).
- [7] F. Salvat, PENELOPE-2018: A code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, OECD/NEA Data Bank, Issy-les-Moulineaux, France, 2019, available from <http://www.nea.fr/lists/penelope.html> (2019).
- [8] GEANT4 Collaboration (Agostinelli. S. et al.), Geant4—a simulation toolkit, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 506 (3) (2003) 250–303 (2003). doi:10.1016/S0168-9002(03)01368-8.

- [9] A. Ahnesjö, Collapsed cone convolution of radiant energy for photon dose calculation in heterogeneous media, *Medical Physics* 16 (4) (1989) 577–592 (1989). doi:10.1118/1.596360.
- [10] Carlsson, Åsa K. and Ahnesjö, Anders, The collapsed cone superposition algorithm applied to scatter dose calculations in brachytherapy, *Medical Physics* 27 (10) (2000) 2320–2332 (2000). doi:10.1118/1.1290485.
- [11] 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 (2012). doi:10.1118/1.4747264.
- [12] Andreo, P., Burns, D. T., Kapsch, R.-P., McEwen, M. and Vatnitsky, S, Status of the update of the IAEA TRS-398 Code of Practice, in: *Book of Extended Synopses, International Symposium "Standards, Applications and QA in Medical Radiation Dosimetry (IDOS 2019)"*, International Atomic Energy Agency, Vienna, 2019, pp. 71–76, available at <https://www.iaea.org/events/idos2019> (2019).
- [13] M. Rivard, B. Coursey, L. Dewerd, W. Hanson, M. S. Huq, G. Ibbott, M. Mitch, R. Nath, J. Williamson, Update of AAPM Task Group No. 43 Report: A revised AAPM protocol for brachytherapy dose calculations, *Medical physics* 31 (2004) 633–74 (04 2004). doi:10.1016/S0360-3016(03)01389-0.
- [14] M. J. Rivard, Brachytherapy dosimetry parameters calculated for a ^{131}Cs source, *Medical Physics* 34 (2) (2007) 754–762 (2007). doi:10.1118/1.2432162.
- [15] M. J. Rivard, L. Beaulieu, F. Mourtada, Enhancements to commissioning techniques and quality assurance of brachytherapy treatment planning systems that use model-based dose calculation algorithms), *Medical Physics* 37 (6Part2) (2010) 2645–2658 (2010). doi:10.1118/1.3429131.
- [16] M. J. Rivard, F. Ballester, W. M. Butler, L. A. DeWerd, G. S. Ibbott, A. S. Meigooni, C. S. Melhus, M. G. Mitch, R. Nath, P. Papagiannis, Supplement 2 for the 2004 update of the AAPM Task Group No. 43 Report: Joint recommendations by the AAPM and GEC-ESTRO, *Medical Physics* 44 (9) (2017) e297–e338 (2017). doi:10.1002/mp.12430.

- [17] AAPM Report No. 21, Recommendations of AAPM Task Group 32: Specification of Brachytherapy Source Strength, Available at https://www.aapm.org/pubs/reports/rpt_21.pdf (1987).
- [18] D. Granero, J. Perez-Calatayud, J. Vijande, F. Ballester, M. J. Rivard, Limitations of the TG-43 formalism for skin high-dose-rate brachytherapy dose calculations, *Medical Physics* 41 (2) (2014) 021703 (2014). doi:10.1118/1.4860175.
- [19] Å. Carlsson Tedgren, G. Carlsson, Specification of absorbed dose to water using model-based dose calculation algorithms for treatment planning in brachytherapy, *Physics in medicine and biology* 58 (2013) 2561–2579 (03 2013). doi:10.1088/0031-9155/58/8/2561.
- [20] H. Afsharpour, G. Landry, B. Reniers, J.-P. Pignol, L. Beaulieu, F. Verhaegen, Tissue modeling schemes in low energy breast brachytherapy, *Physics in medicine and biology* 56 (2011) 7045–60 (11 2011). doi:10.1088/0031-9155/56/22/004.
- [21] G. Landry, B. Reniers, J.-P. Pignol, L. Beaulieu, F. Verhaegen, The difference of scoring dose to water or tissues in Monte Carlo dose calculations for low energy brachytherapy photon sources, *Medical Physics* 38 (3) (2011) 1526–1533 (2011). doi:10.1118/1.3549760.
- [22] J. Sutherland, K. Furutani, Y. Garces, R. Thomson, Model-based dose calculations for ^{125}I lung brachytherapy, *Medical Physics* 39 (7) (2012) 4365–4377 (Jul. 2012). doi:10.1118/1.4729737.
- [23] M. J. Rivard, J. L. M. Venselaar, L. Beaulieu, The evolution of brachytherapy treatment planning, *Medical Physics* 36 (6Part1) (2009) 2136–2153 (2009). doi:10.1118/1.3125136.
- [24] H. Morrison, G. Menon, M. P. Larocque, B. van Veelen, Y. Niatsetski, E. Weis, R. S. Sloboda, Advanced collapsed cone engine dose calculations in tissue media for corm eye plaques loaded with ^{125}I seeds, *Medical Physics* 45 (7) (2018) 3349–3360 (2018). doi:10.1002/mp.12946.
- [25] G. P. Fonseca, Å. C. Tedgren, B. Reniers, J. Nilsson, M. Persson, H. Yoriyaz, F. Verhaegen, Dose specification for ^{192}Ir high dose rate brachytherapy in terms of dose-to-water-in-medium and dose-to-medium-in-medium, *Physics in Medicine and Biology* 60 (11) (2015) 4565–4579 (may 2015). doi:10.1088/0031-9155/60/11/4565.
- [26] Åsa K Carlsson and Anders Ahnesjö, Point kernels and superposition methods for scatter dose calculations in brachytherapy, *Physics in*

- Medicine and Biology 45 (2) (2000) 357–382 (jan 2000). doi:10.1088/0031-9155/45/2/308.
- [27] Carlsson Tedgren, Åsa K. and Ahnesjö, Anders, Accounting for high Z shields in brachytherapy using collapsed cone superposition for scatter dose calculation, Medical Physics 30 (8) (2003) 2206–2217 (2003). doi:10.1118/1.1587411.
- [28] Carlsson Tedgren, Åsa and Ahnesjö, Anders, Optimization of the computational efficiency of a 3D, collapsed cone dose calculation algorithm for brachytherapy, Medical Physics 35 (4) (2008) 1611–1618 (2008). doi:10.1118/1.2889777.
- [29] J E O'Connor, The Variation of Scattered X-Rays with Density in an Irradiated Body, Physics in Medicine and Biology 1 (4) (1957) 352–369 (apr 1957). doi:10.1088/0031-9155/1/4/305.
- [30] B. Van Veelen, Y. Ma, L. Beaulieu, Whitepaper: ACE Advanced Collapsed cone Engine, Veenendal, the Netherlands: Elekta Corporation (2015).
- [31] E. E. Lewis, W. Miller, Computational Methods of Neutron Transport, John Wiley and Sons, (New York), 1984 (1984).
- [32] L. Zheng-Ming, A. Brahme, An overview of the transport theory of charged particles, Radiation Physics and Chemistry 41 (4) (1993) 673 – 703 (1993). doi:10.1016/0969-806X(93)90318-0.
- [33] P. Almond, P. Andreo, O. Mattsson, A. E. Nahum, M. Roos, The Use of Plane-Parallel Ionization Chambers in High-Energy Electron and Photon Beams: an International Code of Practice for Dosimetry, IAEA Technical Reports Series 381 (1997).
- [34] I. Kawrakow, On the effective point of measurement in megavoltage photon beams, Medical Physics 33 (6Part1) (2006) 1829–1839 (2006). doi:10.1118/1.2201147.
- [35] P. Andreo, The status of high-energy photon and electron beam dosimetry five years after the implementation of the iaea code of practice in the nordic countries, Acta Oncologica 32 (5) (1993) 483–500 (1993). doi:10.3109/02841869309096107.
- [36] J. Sempau, P. Andreo, J. Aldana, J. Mazurier, F. Salvat, Electron beam quality correction factors for plane-parallel ionization chambers: Monte carlo calculations using the PENELOPE system, Physics in Medicine and Biology 49 (18) (2004) 4427–4444 (sep 2004). doi:10.1088/0031-9155/49/18/016.

- [37] A. Brahme, H. Svensson, Radiation Beam Characteristics of a 22 MeV Microtron, *Acta Radiologica: Oncology, Radiation, Physics, Biology* 18 (3) (1979) 244–272 (1979). doi:10.3109/02841867909128212.
- [38] J. Greening, *Fundamentals of radiation dosimetry, Medical Physics Handbooks* (1981).
- [39] A. Brahme, P. Andreo, Dosimetry and Quality Specification of High Energy Photon Beams, *Acta Radiologica: Oncology* 25 (3) (1986) 213–223 (1986). doi:10.3109/02841868609136408.
- [40] L. de Prez, J. de Pooter, B. Jansen, T. Perik, F. Wittkämper, Corrigendum: Comparison of k Q factors measured with a water calorimeter in flattening filter free (FFF) and conventional flattening filter (cFF) photon beams (de Prez et al 2018 *Phys. Med. Biol.* 63 045023), *Physics in Medicine & Biology* 64 (3) (2019) 039501 (jan 2019). doi:10.1088/1361-6560/aafa85.
- [41] A. Jablonski, Effects of Auger electron elastic scattering in quantitative AES, *Surface Science* 188 (1) (1987) 164 – 180 (1987). doi:10.1016/S0039-6028(87)80149-8.
- [42] A. L. Tofterup, Theory of elastic and inelastic scattering of electrons emitted from solids: Energy spectra and depth profiling in XPS/AES, *Surface Science* 167 (1) (1986) 70 – 100 (1986). doi:10.1016/0039-6028(86)90787-9.
- [43] P. J. Schultz, K. G. Lynn, Interaction of positron beams with surfaces, thin films, and interfaces, *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 701–779 (Jul 1988). doi:10.1103/RevModPhys.60.701.
- [44] L. Reimer, *Scanning Electron Microscopy*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1985 (1985). doi:10.1007/978-3-662-13562-4.
- [45] F. Titus, Measurements of the energy response functions of scintillators for monoenergetic electrons, *Nuclear Instruments and Methods* 89 (1970) 93 – 100 (1970). doi:10.1016/0029-554X(70)90810-4.
- [46] M. Berger, S. Seltzer, Response functions for sodium iodide scintillation detectors, *Nuclear Instruments and Methods* 104 (2) (1972) 317 – 332 (1972). doi:10.1016/0029-554X(72)90543-5.
- [47] 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 (2006). doi:10.1109/NSSMIC.2006.353845.
- [48] 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 (2017). doi:10.1109/CCDC.2017.7979051.
- [49] M. Bazalova, F. Verhaegen, Monte Carlo simulation of a computed tomography x-ray tube, *Physics in Medicine and Biology* 52 (19) (2007) 5945–5955 (sep 2007). doi:10.1088/0031-9155/52/19/015.
- [50] P. Andreo, Monte Carlo techniques in medical radiation physics, *Physics in Medicine and Biology* 36 (7) (1991) 861–920 (jul 1991). doi:10.1088/0031-9155/36/7/001.
- [51] 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 (2007). doi:10.1118/1.2795842.
- [52] J. Baró, J. Sempau, J. 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 in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 100 (1) (1995) 31–46 (1995). doi:10.1016/0168-583X(95)00349-5.
- [53] EGSnrc: software tool to model radiation transport, <https://github.com/nrc-cnrc/EGSnrc>, accessed: 2017-07-2.
- [54] 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).
- [55] I. Kawrakow, E. Mainegra-Hing, D. W. O. Rogers, F. Tessier, B. R. B. Walters, The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, NRCC Report PIRS-701, National Research Council Canada, Ottawa, CAN, 2019 (2019).
- [56] 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). doi:10.1007/BFb0049033.
- [57] 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 (2005). doi:10.5170/CERN-2005-010.
- [58] J. Sempau and J.M. Fernández-Varea and E. Acosta and F. Salvat, Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 207 (2) (2003) 107–123 (2003). doi:10.1016/S0168-583X(03)00453-1.
- [59] F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea, Overview of physical interaction models for photon and electron transport used in monte carlo codes, Metrologia 46 (Apr 2009). doi:10.1088/0026-1394/46/2/S08.
- [60] F. Salvat, A. Jablonski, C. J. Powell, ELSEPA—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules, Computer Physics Communications 165 (2) (2005) 157–190 (Jan 2005). doi:10.1016/j.cpc.2004.09.006.
- [61] ICRU Report 77, Elastic Scattering of Electrons and Positrons, ICRU, Bethesda, MD, 2007 (2007).
- [62] D. Liljequist, A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV-50 keV electrons in solids, J. Phys. D; (United Kingdom) 16 (1983). doi:10.1088/0022-3727/16/8/023.
- [63] R. M. Sternheimer, The Density Effect for the Ionization Loss in Various Materials, Phys. Rev. 88 (1952) 851–859 (Nov 1952). doi:10.1103/PhysRev.88.851.
- [64] M. J. Berger, M. Inokuti, H. H. Anderson, H. Bichsel, J. A. Dennis, D. Powers, S. M. Seltzer, J. E. Turner, Report 37, Journal of the International Commission on Radiation Units and Measurements os19 (2) (2016) NP–NP (04 2016). doi:10.1093/jicru/os19.2.Report37.
- [65] D. Bote, F. Salvat, Calculations of inner-shell ionization by electron impact with the distorted-wave and plane-wave born approximations, Phys. Rev. A 77 (2008) 042701 (Apr 2008). doi:10.1103/PhysRevA.77.042701.

- [66] X. Llovet, Powell, J. Cedric, F. Salvat, A. Jablonski, Cross sections for inner-shell ionization by electron impact, *Physical and Chemical Reference Data* 43 (2014) 013102 (2014). doi:10.1063/1.4832851.
- [67] 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 (1) (1985) 95–134 (1985). doi:10.1016/0168-583X(85)90707-4.
- [68] 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 (1986). doi:10.1016/0092-640X(86)90014-8.
- [69] E. Acosta, X. Llovet, F. Salvat, Monte carlo simulation of bremsstrahlung emission by electrons, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 3228–3230 (2002). doi:10.1016/j.radphyschem.2005.05.008.
- [70] A. Poskus, BREMS: A program for calculating spectra and angular distributions of bremsstrahlung at electron energies less than 3 MeV, *Computer Physics Communications* 232 (2018) 237–255 (2018). doi:10.1016/j.cpc.2018.04.030.
- [71] W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press, 1954 (1954).
- [72] D. T. Cromer, D. Liberman, Relativistic Calculation of Anomalous Scattering Factors for X Rays, *The Journal of Chemical Physics* 53 (1970) 1891–1898 (1970). doi:10.1063/1.1674266.
- [73] D. E. Cullen, J. H. Hubbell, L. Kissel, EPDL97 The Evaluated Data Library, 097 Version, UCRL-50400, Lawrence Livermore National Laboratory, 1997, Available at <https://www.osti.gov/servlets/purl/295438> (1997).
- [74] 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 (1996). doi: [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(96\)00652-3](https://doi.org/10.1016/0168-9002(96)00652-3).
- [75] L. Sabbatucci and F. Salvat, Theory and calculation of the atomic photoeffect”, *Rad. Phys. Chem.* 121 (2016) 122–140 (2016). doi: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2015.10.021>.

- [76] 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 (1972). doi:10.1103/PhysRevA.5.1063.
- [77] M. J. Berger, J. S. Coursey, M. A. Zucker and J. Chang, Stopping-power and range tables for electrons, protons and helium ions, Tech. rep., Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD., 2005, Available from <http://www.nist.gov/pml/data/star/index.cfm> (2005).
- [78] 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 (1991). doi:10.2172/10121422.
- [79] 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 (Jan 2003). doi:10.1103/RevModPhys.75.35.
- [80] J. A. Bearden, X-ray wavelengths, *Rev. Mod. Phys.* 39 (1967) 78–124 (Jan 1967). doi:10.1103/RevModPhys.39.78.
- [81] Martin J. Berger, Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles, in: B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg (Eds.), *Methods in Computational Physics*, Vol. 1, Academic Press, New York, 1963, pp. 135–215, Available at <http://umich.edu/~nersa590/Berger-1963.pdf> (1963).
- [82] H. W. Lewis, Multiple scattering in an infinite medium, *Phys. Rev.* 78 (1950) 526–529 (1950). doi:10.1103/PhysRev.78.526.
- [83] 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).
- [84] J. M. Fernández-Varea, R. Mayol, J. Baró, F. Salvat, On the theory and simulation of multiple elastic scattering of electrons, *Nucl. Instrum. Meth. B* 73 (1993) 447–473 (1993). doi:10.1016/0168-583X(93)95827-R.
- [85] F. Salvat, Class II algorithm for charged particle transport simulation, Private communication.

- [86] S. Goudsmit, J. L. Saunderson, Multiple scattering of electrons, *Phys. Rev.* 57 (1940) 24–29 (1940). doi:10.1103/PhysRev.57.24.
- [87] S. Goudsmit, J. L. Saunderson, Multiple scattering of electrons. II, *Phys. Rev.* 58 (1940) 36–42 (1940). doi:10.1103/PhysRev.58.36.
- [88] L. D. Landau, On the energy loss of fast particles by ionization, *Journal of Physics-USSR* 8 (1944) 201–205 (1944).
- [89] F. James, Monte carlo theory and practice, *Reports on Progress in Physics* 43 (9) (1980) 1145–1189 (sep 1980). doi:10.1088/0034-4885/43/9/002.
- [90] A. F. Bielajew, D. W. O. Rogers, Variance-reduction techniques, *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, chapter 18 (Plenum, New York), 1988 (1988). doi:10.1007/978-1-4613-1059-4_18.
- [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 (2011) 5887 – 5895 (2011). doi:10.1118/1.3643029.
- [92] A. Jaleel, W. Hasenplaugh, M. Qureshi, J. Sebot, S. Steely, J. Emer, Adaptive insertion policies for managing shared caches, in: *2008 International Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT)*, 2008, pp. 208–219 (2008). doi:10.1145/1454115.1454145.
- [93] Y. A. Nedbailo, Avoiding common scalability pitfalls in shared-cache chip multiprocessor design, in: *2019 International Conference on Engineering and Telecommunication (EnT)*, 2019, pp. 1–5 (2019). doi:10.1109/EnT47717.2019.9030579.
- [94] S. De Pestel, S. V. d. Steen, S. Akram, L. Eeckhout, Rppm: Rapid performance prediction of multithreaded applications on multicore hardware, *IEEE Computer Architecture Letters* 17 (2) (2018) 183–186 (2018). doi:10.1109/LCA.2018.2849983.
- [95] D. Eklov, E. Hagersten, Statstack: Efficient modeling of lru caches, in: *2010 IEEE International Symposium on Performance Analysis of Systems Software (ISPASS)*, 2010, pp. 55–65 (2010). doi:10.1109/ISPASS.2010.5452069.
- [96] C. Hong, W. Bao, A. Cohen, S. Krishnamoorthy, L.-N. Pouchet, F. Rastello, J. Ramanujam, P. Sadayappan, Effective padding of

- multidimensional arrays to avoid cache conflict misses, in: Proceedings of the 37th ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation, PLDI '16, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2016, p. 129–144 (2016). doi:10.1145/2908080.2908123.
- [97] K. Ishizaka, M. Obata, H. Kasahara, Cache optimization for coarse grain task parallel processing using inter-array padding, in: L. Rauchwerger (Ed.), Languages and Compilers for Parallel Computing, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004, pp. 64–76 (2004). doi:10.1007/978-3-540-24644-2_5.
- [98] C. L. Lawson, R. J. Hanson, D. R. Kincaid, F. T. Krogh, Basic linear algebra subprograms for fortran usage, ACM Trans. Math. Softw. 5 (3) (1979) 308–323 (Sep. 1979). doi:10.1145/355841.355847.
- [99] An Updated Set of Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS), ACM Trans. Math. Softw. 28 (2) (2002) 135–151 (Jun. 2002). doi:10.1145/567806.567807.
- [100] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, D. Sorensen, LAPACK Users' Guide, 3rd Edition, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1999 (1999). doi:10.1137/1.9780898719604.
- [101] A. Badal, J. Sempau, A package of linux scripts for the parallelization of monte carlo simulations, Computer Physics Communications 175 (6) (2006) 440 – 450 (2006). doi:10.1016/j.cpc.2006.05.009.
- [102] R. Cruise, R. Sheppard, V. Moskvina, Parallelization of the penelope monte carlo particle transport simulation package, 2003 (2003).
- [103] E. Z. Zhang, Y. Jiang, X. Shen, Does cache sharing on modern cmp matter to the performance of contemporary multithreaded programs?, SIGPLAN Not. 45 (5) (2010) 203–212 (Jan. 2010). doi:10.1145/1837853.1693482.
- [104] A. A. Badawy, D. Yeung, Guiding locality optimizations for graph computations via reuse distance analysis, IEEE Computer Architecture Letters 16 (2) (2017) 119–122 (2017). doi:10.1109/LCA.2017.2695178.
- [105] M. Wickramasinghe, H. Guo, Data-space relocation to improve data cache performance for embedded multi-threaded processor systems, in: Proceedings of the Fifth International Conference on Network,

- Communication and Computing, ICNCC '16, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2016, p. 193–197 (2016). doi:10.1145/3033288.3033335.
- [106] H. Khaleghzadeh, H. Deldari, R. Reddy, A. Lastovetsky, Hierarchical multicore thread mapping via estimation of remote communication, *The Journal of Supercomputing* 74 (3) (2018) 1321–1340 (2018). doi:10.1007/s11227-017-2176-6.
- [107] Z. Majo, T. R. Gross, A library for portable and composable data locality optimizations for numa systems, *ACM Trans. Parallel Comput.* 3 (4) (Mar. 2017). doi:10.1145/3040222.
- [108] M. S. Papamarcos, J. H. Patel, A low-overhead coherence solution for multiprocessors with private cache memories, *SIGARCH Comput. Archit. News* 12 (3) (1984) 348–354 (Jan. 1984). doi:10.1145/773453.808204.
- [109] W. J. Bolosky, M. L. Scott, False sharing and its effect on shared memory performance, in: *USENIX Systems on USENIX Experiences with Distributed and Multiprocessor Systems - Volume 4, Sedms'93*, USENIX Association, Berkeley, CA, USA, 1993, pp. 3–3 (1993). doi:10.5555/1295480.1295483.
- [110] 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 (2018). doi:10.1145/3178487.3178499.
- [111] 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 (2017). doi:10.1145/3123939.3123947.
- [112] 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 (2019). doi:10.1145/3314221.3314644.
- [113] K. Driesen, U. Hölzle, The Direct Cost of Virtual Function Calls in C++, in: *Proceedings of the 11th ACM SIGPLAN Conference on*

- Object-Oriented Programming, Systems, Languages, and Applications, OOPSLA '96, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 1996, p. 306–323 (1996). doi:10.1145/236337.236369.
- [114] F. Nicart, Towards scalable virtuality in c++, *Software: Practice and Experience* 38 (14) (2008) 1451–1473 (2008). doi:10.1002/spe.871.
- [115] M. Zhang, R. N. Green, T. G. Rogers, Poster: Quantifying the direct overhead of virtual function calls on massively parallel architectures, in: 2019 28th International Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT), 2019, pp. 497–498 (2019). doi:10.1109/PACT.2019.00063.
- [116] P. Andreo, Dose to ‘water-like’ media or dose to tissue in MV photons radiotherapy treatment planning: still a matter of debate, *Physics in Medicine and Biology* 60 (1) (2014) 309–337 (dec 2014). doi:10.1088/0031-9155/60/1/309.
- [117] F. Ballester, Å. 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. L. Smith, R. M. Thomson, F. Verhaegen, J. Vijande, Y. Ma, L. Beaulieu, A generic high-dose rate ^{192}Ir brachytherapy source for evaluation of model-based dose calculations beyond the TG-43 formalism, *Medical Physics* 42 (6Part1) (2015) 3048–3062 (2015). doi:10.1118/1.4921020.
- [118] S. Kumar, D. D. Deshpande, A. E. Nahum, Dosimetric response of variable-size cavities in photon-irradiated media and the behaviour of the Spencer–Attix cavity integral with increasing Δ , *Physics in Medicine and Biology* 61 (7) (2016) 2680–2704 (mar 2016). doi:10.1088/0031-9155/61/7/2680.
- [119] K. Sowards, Monte Carlo dosimetric characterization of the IsoAid ADVANTAGE P103d brachytherapy source, *Journal of Applied Clinical Medical Physics* 8 (2007) 18 – 25 (2007). doi:10.1120/jacmp.v8i2.2393.
- [120] J. Dolan, Z. Li, J. F. Williamson, Monte Carlo and experimental dosimetry of an brachytherapy seed, *Medical Physics* 33 (12) (2006) 4675–4684 (2006). doi:10.1118/1.2388158.
- [121] C. M. Baglin, Nuclear Data Sheets for $A = 192$, *Nuclear Data Sheets* 113 (8) (2012) 1871 – 2111 (2012). doi:10.1016/j.nds.2012.08.001.

- [122] ICRP 2009, Adult reference computational phantoms, ICRP Publication 110 Ann. ICRP 39 2 Available at <https://www.icrp.org/publication.asp?id=icrp%20publication%20110>.
- [123] ICRU 1992, Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues, (ICRU Report vol 46) (Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units and Measurements) Available at https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:23082971.
- [124] Ouhib Z, Kasper M, Perez Calatayud J, et al. , Aspects of dosimetry and clinical practice of skin brachytherapy: The american brachytherapy society working group report, *Brachytherapy* 14 (2015) 840–858 (2015). doi:10.1016/j.brachy.2015.06.005.
- [125] H. Niu, W. C. Hsi, J. C. H. Chu, M. C. Kirk, E. Kouwenhoven, Dosimetric characteristics of the leipzig surface applicators used in the high dose rate brachy radiotherapy, *Medical Physics* 31 (12) (2004) 3372–3377 (2004). doi:10.1118/1.1812609.
- [126] Pérez-Calatayud J, Granero D, Ballester F, et al., A dosimetric study of leipzig applicators, *Int J Radiat Oncol Biol Phys* 62(2) (2005). doi:10.1016/j.ijrobp.2005.02.028.
- [127] D. Granero, J. Pérez-Calatayud, J. Gimeno, F. Ballester, E. Casal, V. Crispín, R. van der Laarse, Design and evaluation of a HDR skin applicator with flattening filter, *Medical Physics* 35 (2) (2008) 495–503 (2008). doi:10.1118/1.2825622.
- [128] C. Candela-Juan, Y. Niatsetski, R. van der Laarse, D. Granero, F. Ballester, J. Perez-Calatayud, J. Vijande, Design and characterization of a new high-dose-rate brachytherapy valencia applicator for larger skin lesions, *Medical Physics* 43 (4) (2016) 1639–1648 (2016). doi:10.1118/1.4943381.
- [129] G. Anagnostopoulos, M. Andrassy, D. Baltas, The bebig valencia-type skin applicators: Dosimetric study and implementation of a dosimetric hybrid technique, *Brachytherapy* 16 (5) (2017) 1044 – 1056 (2017). doi:10.1016/j.brachy.2017.04.243.
- [130] A. Tormo, F. Celada, S. Rodriguez, R. Botella, A. Ballesta, M. Kasper, Z. Ouhib, M. Santos, J. Perez-Calatayud, Original paper
non-melanoma skin cancer treated with hdr valencia applicator: clinical outcomes, *Journal of Contemporary Brachytherapy* 6 (2) (2014) 167–172 (2014). doi:10.5114/jcb.2014.43247.

- [131] D. Granero, J. Vijande, F. Ballester, M. J. Rivard, Dosimetry revisited for the HDR brachytherapy source model mHDR-v2, *Medical Physics* 38 (1) (2011) 487–494 (2011). doi:10.1118/1.3531973.
- [132] F. Ballester, D. Granero, J. Pérez-Calatayud, C. S. Melhus, M. J. Rivard, Evaluation of high-energy brachytherapy source electronic disequilibrium and dose from emitted electrons, *Medical Physics* 36 (9Part1) (2009) 4250–4256 (2009). doi:10.1118/1.3194754.
- [133] Mohan R, Chui C, Lidofsky L, Energy and angular distributions of photons from medical linear accelerators, *Med Phys.* 12 (5) (1985) 592–7 (1985). doi:10.1118/1.595680.
- [134] D. T. Burns, Calculation of k wall for 60 Co air-kerma standards using PENELope, 2003, available at [https://www1.bipm.org/cc/CCRI\(I\)/Allowed/16/CCRI\(I\)03-40.pdf](https://www1.bipm.org/cc/CCRI(I)/Allowed/16/CCRI(I)03-40.pdf) (2003).
- [135] A. Badal, A. Badano, Accelerating monte carlo simulations of photon transport in a voxelized geometry using a massively parallel graphics processing unit, *Medical Physics* 36 (11) (2009) 4878–4880 (2009). doi:10.1118/1.3231824.
- [136] M. Rodríguez, J. Sempau, C. Bäumer, B. Timmermann, L. Brullalla, DPM as a radiation transport engine for PRIMO, *Radiation Oncology (London, England)* 13 (2018). doi:10.1186/s13014-018-1188-6.
- [137] Y. Wang, T. R. Mazur, O. Green, Y. Hu, H. Li, V. Rodriguez, H. O. Wooten, D. Yang, T. Zhao, S. Mutic, H. H. Li, A gpu-accelerated monte carlo dose calculation platform and its application toward validating an mri-guided radiation therapy beam model, *Medical Physics* 43 (7) (2016) 4040–4052 (2016). doi:10.1118/1.4953198.
- [138] N. Nethercote, J. Seward, Valgrind: A framework for heavyweight dynamic binary instrumentation, *SIGPLAN Not.* 42 (6) (2007) 89–100 (Jun. 2007). doi:10.1145/1250734.1250746.
- [139] J. Weidendorfer, M. Kowarschik, C. Trinitis, A tool suite for simulation based analysis of memory access behavior, in: M. Bubak, G. D. van Albada, P. M. A. Sloot, J. Dongarra (Eds.), *Computational Science - ICCS 2004*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004, pp. 440–447, https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-540-24688-6_58 (2004).
- [140] DICOM, <https://www.dicomstandard.org/>, accessed: 2019-09-28.

- [141] DCMTK, <https://github.com/DCMTK/dcmstk>, accessed: 2019-09-28.
- [142] S. Jan, D. Benoit, E. Becheva, T. Carlier, F. Cassol, P. Descourt, T. Frisson, L. Grevillot, L. Guigues, L. Maigne, C. Morel, Y. Perrot, N. Rehfeld, D. Sarrut, D. R. Schaart, S. Stute, U. Pietrzyk, D. Visvikis, N. Zahra, I. Buvat, GATE V6: a major enhancement of the GATE simulation platform enabling modelling of CT and radiotherapy, *Physics in Medicine and Biology* 56 (4) (2011) 881–901 (jan 2011). doi:10.1088/0031-9155/56/4/001.