

Modelagem e Validação Computacional da Câmara de Extrapolação PTW 23392

Computational Modeling and Validation of the Extrapolation Chamber PTW 23392

L.F. De Araújo¹, J. A. Benavente C.¹, T. C. F. Fonseca¹

¹Departamento de Engenharia Nuclear, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil

Resumo

Metodologias para medição de dose e taxa de dose absorvida de radionuclídeos emissores de radiação beta são necessárias para a caracterização de campos de radiação e avaliação do desempenho de instrumentos de medição. Ferramentas computacionais têm permitido avanços significativos na otimização e criação de metodologias para sistemas de medição. Estas possibilitam modelar, simular e analisar a influência de diferentes parâmetros que compõem um sistema de medição, isoladamente. O método matemático de Monte Carlo (MC) é um método estatístico, e que se destaca principalmente na área da física das radiações. O código computacional de Monte Carlo MCNPX é reconhecido internacionalmente e vem sendo utilizado a muitos anos para simular o transporte de diversos tipos de radiações e energias. Neste trabalho, o MCNPX foi utilizado para modelar e simular um arranjo composto de uma câmara de extrapolação e uma fonte de ⁸⁵Kr, um emissor de partículas beta com energia máxima de 0,687 MeV e meia-vida de 10,7 anos. A validação do modelo da câmara PTW-23392 foi realizada comparando os resultados obtidos nas simulações com os resultados publicados em literatura. A resposta da câmara é obtida pela energia depositada no volume sensível em função de sua profundidade. Uma resposta linear foi obtida para as simulações realizadas, de acordo com o esperado. Os fatores de transmissão foram calculados e os resultados obtidos comparados com valores obtidos através de métodos experimentais e simulados publicados em literatura. Diferenças de 3,5% e 6,2% foram encontradas respectivamente. O valor da taxa de dose encontrada nas simulações difere em 3,94% quando comparadas com resultados de simulação e 0,77% para resultados de calibração.

Palavras-chave: Instrumentação nuclear; Radiação beta; Modelagem computacional; MCNPX.

Abstract

Methodologies for measuring the absorbed dose and dose rate of beta emitter radionuclides are needed for the characterization of the radiation field and evaluation of the performance of measuring instruments. Computational modeling has been brought significant advances in the optimization and development of new methodologies for measurement systems. The computational modeling allows the creation of a model, simulate it, and analyze the influence of different parameters of the measurement system, separately. The Monte Carlo (MC) mathematical method is a statistical method, and it stands out mainly in radiation physics. The Monte Carlo MCNPX computational code is internationally recognized and has been used for many years to simulate the transport of different types of radiation and energies. In this work, the MCNPX was used to model and simulate an experiment composed of an extrapolation chamber and ⁸⁵Kr source, a beta particle emitter with a maximum energy of 0.687 MeV and half-life of 10.7 years. The validation of the PTW-23392 chamber model was performed by comparing the results obtained in the simulations with the results published in the literature. The response of the chamber is obtained by computing the energy deposited in the sensitive volume as a function of its depth. A linear response was obtained for the simulations performed, as expected. The transmission factors were calculated, and the results obtained were compared to values obtained through experimental and simulated methods published in the literature. Differences of 3.5% and 6.2% were found respectively. The dose rate value found in the simulation differs by 3.94% when compared to the simulated results and 0.77% for calibration or experimental results.

Keywords: Nuclear instrumentation; Beta radiation; Computational modeling; MCNPX.

1. Introdução

Câmaras de ionização do tipo placas paralelas, em geral, possuem volume sensível fixo e dependendo da finalidade possuem capacidade de detectar fótons e/ou elétrons. Entretanto, a câmara de extrapolação é um tipo de câmara de ionização com volume sensível variável capaz de medir com precisão a carga específica variando, por um controle de separação dos eletrodos, a massa de ar no interior da cavidade (1). Este tipo de câmara é útil para a

detecção de radiação beta e X de baixas energias permitindo medir valores de dose num pequeno volume sensível governado pela teoria cavitária de Bragg-Gray para volumes pequenos (1). Câmaras de extrapolação são utilizadas principalmente em laboratórios de calibração do tipo padrão primário ou secundário para medir campos de dosimetria de feixes de radiação beta e X (2,3). A caracterização de sistemas de dosimetria beta envolve a determinação das taxas de dose absorvidas no ar e/ou em tecidos

com pequenas espessuras de materiais de tecidos equivalentes (3-5).

O método matemático de Monte Carlo (MC) destaca-se na área da física das radiações como uma ferramenta para modelagem e simulação computacional (6-8). Vários códigos computacionais existem para a simulação do transporte de partículas e são utilizados como apoio às medidas experimentais (9,10). Diversos trabalhos publicados diariamente utilizam códigos de MC para diferentes cálculos nas áreas da dosimetria beta bem como em outras várias outras áreas de pesquisa (11-13).

Este trabalho apresenta a modelagem e simulação computacional da câmara de extrapolação PTW modelo 23392, utilizada em um sistema padrão secundário beta e uma fonte de ^{85}Kr (criptônio), um emissor beta com energia máxima de 0,687 MeV e meia-vida de 10,7 anos. O objetivo foi validar o modelo computacional desenvolvido. Utilizá-lo para o cálculo da taxa de dose absorvida em diferentes campos de radiação beta. Para validar o *setup* computacional, câmara e fonte, foram realizadas comparações entre os resultados obtidos nas simulações e calculados com a equação de referência da taxa de dose com os resultados publicados por Faria *et al.* 2015 (13). A resposta da câmara em função da profundidade do volume sensível e o fator de transmissão também foram calculados e comparados. Todos os resultados estão apresentados e discutidos neste artigo.

2. Materiais e Métodos

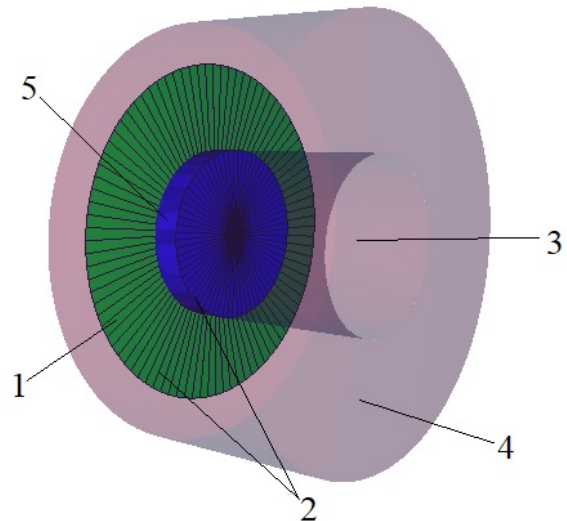
2.1. Método de Simulação

O transporte de elétrons e fótons foi realizado via Monte Carlo N-Particle eXtended (MCNPX)(14), que permite simular o transporte de partículas e energias em diferentes geometrias utilizando diversos materiais. Foi desenvolvido um arquivo de entrada (*input-file*) que contém as informações sobre a geometria do *setup*, fonte e detectores. Em detalhes, o *input-file* contém as superfícies geométricas, os volumes, a descrição dos materiais e suas densidades de todo o modelo composto pela câmara e fonte de radiação. A posição e as características da fonte radioativa, ^{85}Kr , e os *tallies* desejados, que são os resultados que serão computados também fazem parte do *input-file*. O número de partículas ou nps (*number of started particles*) definida nas simulações foi próximo de $5,0 \times 10^8$. Um nps ideal é alcançado quando todos os testes estatísticos apresentados pelo código computacional MCNPX são satisfeitos (15) e uma confiança estatística de até 1% (16) é atingida. A energia de corte (*cut-off energy*) de 1 keV foi adotada nas simulações.

A câmara de extrapolação PTW 23392 foi modelada observando as dimensões e volumes adotados por Faria *et al.* 2015 (13) bem como do manual de instruções da câmara (17), de Benavente (18) e Antônio (2). A superfície do tipo *macrobody* RCC (*Right Circular Cylinder*) com uma geometria simétrica cilíndrica rotacional em relação ao eixo z foi utilizada. A Figura 1 mostra o modelo desenvolvido.

Devido à dificuldade computacional em realizar o transporte de partículas beta, técnicas de redução de variância (RV) foram utilizadas com o objetivo de "popular" o volume sensível da câmara e melhorar a estatística do problema.

Figura 1 - Esquema tridimensional da Câmara de Extrapolação PTW-23392. 1 - Janela de entrada de 3,5 μm . 2 - Eletrodo revestido com grafite de 0,35 μm . 3 - Barra de PMMA. 4 - Corpo Acrílico de PMMA $\phi=140$ mm. 5 - Volume Sensível de Ar $\phi=30$ mm. A Espessura de Absorção $\phi=60,5$ mm, quando utilizada fica à frente da Janela de entrada. Visualização feita pelo programa VISED (26).



Fonte: O autor (2019).

Aqui, o *Geometry Splitting*, uma técnica de RV disponível no código MCNPX foi configurada. Neste caso, a região de interesse, ou seja, o volume sensível, tem uma importância maior do que as demais regiões do modelo. Isso faz com que a partícula transportada na região de interesse seja artificialmente dividida em partes iguais. Esta divisão não altera, em nenhum aspecto, os parâmetros físicos da partícula beta e suas interações, mas tem por finalidade melhorar a estatística do problema (19,20).

2.2. Fonte, filtro e absorvedor

O espectro de energia do radionuclídeo ^{85}Kr foi obtido no ICRP Report 107 (21). A taxa de emissão dos outros tipos de radiações tais como: os raios X, gama, elétrons de conversão interna e elétrons *Auger* são menores que a taxa de emissão das partículas beta emitidas e, portanto, não contribuem de forma significativa para os resultados da simulação (22).

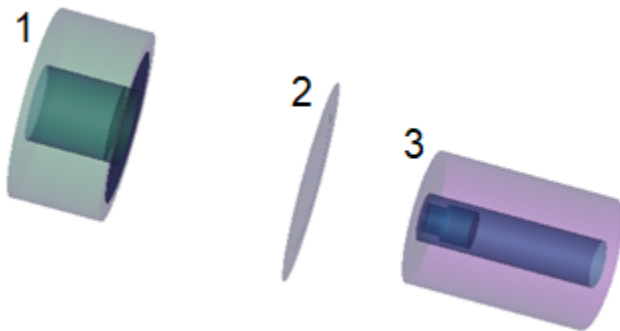
A geometria da fonte descrita por Faria *et al.* 2015 (13), consiste em material ativo de ^{85}Kr posicionado dentro de suportes cilíndricos compostos de diferentes camadas de materiais, e uma janela de titânio com densidade superficial de $11,3 \text{ mg.cm}^{-2}$ (23). Aqui, ela foi definida como fonte pontual colimada em forma de um cone em direção à câmara com um semi-ângulo θ em torno do eixo z (19). O vértice do cone está imerso em material ativo de número atômico, $Z=36$ e $0,0191 \text{ g.cm}^{-3}$ de

densidade³. A descrição geométrica com os respectivos materiais que compõem a fonte está catalogada em Eckert & Ziegler (24). A distância padrão de calibração entre fonte e câmara, descrita no manual de operação do sistema BSS2 (BETA SECONDARY STANDARD 2) é de 30 cm e foi modelado conforme os padrões adotados (23).

O filtro é feito de material Tereftalato de Polietileno (Hostaphan). Sua geometria constitui de folhas circulares descritas no manual de operação do sistema (23). O filtro é utilizado para uniformizar o fluxo de partículas beta que atingem a superfície de entrada (janela) da câmara de extrapolação (26). O filtro foi posicionado a 10 cm da fonte e centralizado no eixo z (23,25).

Os absorvedores representam os tecidos equivalentes, estes são posicionados em frente à janela de entrada da câmara, conforme especificado na ISO 6980 (25). A Figura 2 mostra a geometria modelada no MCNPX.

Figura 2 - Esquema em 3D do sistema Câmara-Fonte com suas respectivas geometrias cilíndricas. 1 – Câmara de extrapolação. 2 – Filtro. 3 – Fonte. Visualização feita pelo programa VISED (26). Ilustração fora de escala.



Fonte: O autor (2019).

2.3. Fator de Transmissão, T

O fator de transmissão (T) de dose, pode ser definido como a medida da relação entre a dose efetiva a uma certa profundidade no tecido e a dose na superfície do tecido. Para calcular o fator de transmissão de dose, os sistemas de calibração padrão primário ou secundário são utilizados. Os tecidos equivalentes ou simplesmente, espessuras de absorção, como são normalmente referenciados, são posicionados em frente à janela de entrada da câmara. A câmara é posicionada a 30 cm de distância da fonte de radiação, ⁸⁵Kr, como definido no manual de operação do sistema BSS2, a uma profundidade do volume sensível de 4,0 mm (23,27,28). A equação (1) proposta por Faria *et al.* 2015 (13) foi utilizada para o cálculo do fator de transmissão:

$$T = \left(\frac{a - a_o}{a} \right)^2 \frac{E_m(d)}{E_m(0)} \quad (1)$$

onde $E_m(d)$ é a energia média definido pelo *tally *F8* disponível no código MCNPX, que computa a deposição de energia média no volume sensível da câmara, para uma espessura d de absorção; $E_m(0)$ é a energia média extrapolada para uma espessura de absorção nula (representando a superfície da pele); a é a distância de calibração entre a câmara e fonte de radiação, e a_o é a espessura de absorção. O termo quadrático na equação (1) é um fator de correção geométrico (21) definido como um valor muito próximo de uma unidade.

2.4. Taxa de dose no tecido, \dot{D}

A determinação da taxa de dose pode ser realizada utilizando a equação (2) proposta por Faria *et al.* 2015 (13):

$$\dot{D} = \frac{T_{(0,07)} A s_{t,a} \sum_{i=1}^n E_m^i r_i}{M} \quad (2)$$

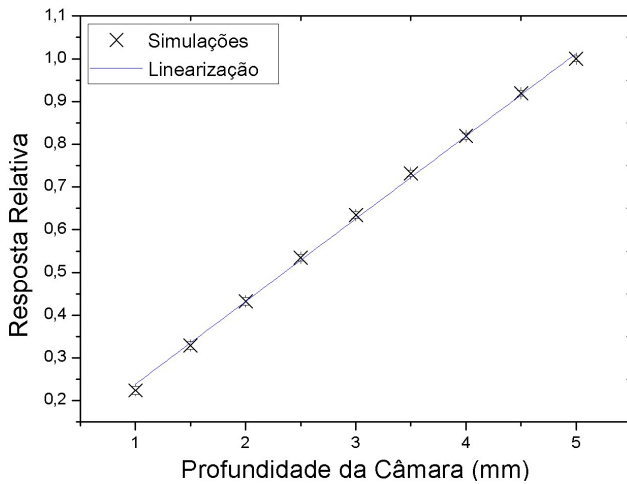
onde $T_{(0,07)}$ é o fator de transmissão com 0,07 mm de espessura; A é a atividade nominal em Bq definida pelo sistema BSS2 (23), ou seja, a atividade nominal é de 3,6 GBq ; $s_{t,a}$ é o quociente do poder de frenamento mássico eletrônico entre tecido e ar, reportado pela ISO 6980 (5), ou seja, para o ⁸⁵Kr este valor é igual a 1,12; r_i é a taxa da produção de partícula por decaimento nuclear; E_m é a energia média em MeV, normalizada pelo número de partículas depositada dentro do volume sensível da câmara, calculada com o *tally *F8:e,p.*, e M é a massa do volume sensível da câmara que foi configurada a 5,0 mm de profundidade, com massa de $4,25882 \times 10^{-3} g$.

3. Resultados

3.1. Resposta linear da câmara

A curva de extrapolação foi obtida computando as energias depositadas no volume sensível da câmara para diferentes profundidades. Em outras palavras, foram medidas as energias depositadas, no volume sensível da câmara em função da distância entre a janela de entrada e o eletrodo coletor. A respostas obtidas são normalmente utilizadas para criar uma curva que é característica deste tipo de sistema. A resposta obtida para a câmara de extrapolação modelada é praticamente linear em função de sua profundidade. A Figura 3 mostra a resposta relativa em relação a profundidade da câmara. Este comportamento linear mostra uma relação direta que, quanto menor a profundidade da câmara menor a energia depositada. O valor do coeficiente de determinação R^2 da regressão linear é maior do que 0,999.

Figura 3 - Resposta linear da câmara de extrapolação, modelada computacionalmente para o ⁸⁵Kr a uma distância de 30 cm da câmara-fonte. As barras de erro são menores que os pontos.



Fonte: O autor (2019).

3.2. Fator de Transmissão, T

A Tabela 1 apresenta os valores dos fatores de transmissão, T, calculados utilizando a Equação (1).

Tabela 1 - Comparação com os Fatores de Transmissão para o ⁸⁵Kr. O parâmetro a₀ representa a espessura de absorção. Os índices Cal, Ref e Sim representam os fatores de transmissão obtidos no processo de calibração (13), referência (13) e simulado neste trabalho, respectivamente. Δ é a diferença em % em relação dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados publicados em literatura (13).

a ₀ (mm)	T _{Cal}	T _{Ref}	T _{Sim}	Δ _{Cal}	Δ _{Ref}
0,00	1,05	1,05±0,01	0,996±0,003	5,2%	5,2%
0,02	1,04	1,03±0,01	1,077±0,004	3,6%	4,6%
0,04	1,03	1,02±0,01	1,082±0,004	5,0%	6,0%
0,05	1,02	1,01±0,01	1,071±0,004	5,0%	6,0%
0,07	1,00	1,00±0,01	1,028±0,004	2,8%	2,8%
0,10	0,96	0,98±0,01	0,958±0,004	0,2%	2,3%
0,20	0,78	0,91±0,01	0,751±0,004	3,0%	16,9%

Fonte: O autor (2019).

O fator de transmissão foi comparado com valores de calibração e os simulados, publicados em literatura (13) que apresentou uma diferença média de 3,5% e 6,2% respectivamente. A maior diferença encontrada foi na comparação do fator T para a espessura de absorção de 0,2 mm, sendo de 16,9% quando comparado com o valor de referência simulado pelo autor Faria *et al.* 2015 (13) e 3,0% quando comparado com valor de calibração.

Foi observado um decréscimo nos valores dos fatores de transmissão de dose quando houve um crescimento da espessura de absorção. Este comportamento é esperado para este tipo de modelo. Quanto maior a espessura de absorção maior atenuação das partículas beta é observada.

3.3. Taxa de dose no tecido, Ḋ

A Tabela 2 mostra os valores da taxa de dose Ḋ em μGy.s⁻¹ calculados utilizando a Equação (2).

Tabela 2 – Taxa de Dose (μGy.s⁻¹) para ⁸⁵Kr. Os índices Cal, Ref e Sim representam as taxas de dose obtidos no processo de calibração (13), referência (13) e simulado neste trabalho, respectivamente. θ representa o cone do semi-ângulo do feixe, f_{in} e f_{out} são as frações das partículas geradas dentro e fora do cone descrito na modelagem da fonte de radiação, respectivamente. Δ é a diferença em % em relação dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados publicados em literatura (13).

Ḋ _{Cal}	45,5±0,5
Ḋ _{Ref}	43,37±0,02
Ḋ _{Sim}	45,15±0,01
Δ _{Cal}	0,77%
Δ _{Ref}	3,94%
θ, f _{in} , f _{out}	10; 0,76; 0,24

Fonte: O autor (2019).

Uma variação de 0,77% e 3,94% foram observados quando comparados os valores de taxa de dose calculados no modelo proposto com os resultados de calibração e de referência publicados em literatura (13).

4. Conclusão

Este artigo apresenta a modelagem e simulação computacional da câmara de extrapolação PTW 23392 e a fonte de radiação ⁸⁵Kr. O objetivo foi a validação do modelo do arranjo experimental desenvolvido para futuramente ser utilizado para cálculos diversos com outros campos de radiação beta. A validação do modelo foi realizada comparando os resultados simulados e calculados de dose e fatores de transmissão com resultados publicados em literatura.

Foram observados que em relação à resposta da câmara, a energia depositada no volume da câmara apresenta a linearidade esperada, atingindo o objetivo principal, que seria obter uma resposta da câmara modelada em relação ao que foi publicado em literatura (13). Pode-se considerar que os resultados encontrados neste trabalho estão em melhor acordo com os resultados da calibração. O mesmo ocorre para os resultados de taxa de dose calculada e comparada com o resultado simulado de Faria e o valor de calibração publicado pelo mesmo autor (13). O modelo computacional desenvolvido e proposto foi validado e tem maior aproximação com os resultados da calibração.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) no desenvolvimento deste trabalho, através da concessão da bolsa de pesquisa do número de processo 88882.380724/2019-01

Referências

- De Araujo, L. F. Metodologia para modelagem de uma câmara de extrapolação em campos padrões secundários de radiação beta. Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte, Brasil; 2020.
- Antônio P. L. Estabelecimento de padronização Primária e de métodos relativos com o uso de técnicas luminescentes em dosimetria da radiação beta. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares. São Paulo, Brasil; 2013.

3. Behrens R. Simulation of the radiation fields of the Beta Secondary Standard BSS 2. *Journal of Instrumentation*. 2013 02;8:P02019.
4. Caldas L. V. E. Performance characteristics of an extrapolation chamber for beta radiation detection. *J Appl Radiat. Isot.* 1986;9(37):988-990.
5. ISO. International Organization for Standardization. Nuclear energy-Reference beta-particle radiation Part 2: Calibration fundamentals related to basic quantities characterizing the radiation fields. Geneve. ISO/FDIS 6980-2, 2004.
6. Fonseca T., Antunes P., Belo M., Bastos F., Campos T., Geraldo J., *et al.* MCMEG: Intercomparison exercise on prostate radiotherapy dose assessment. *Radiation Physics and Chemistry*. 2019 04;
7. Mendes B., M. Trindade B., Fonseca T., Campos T. Assessment of radiation-induced secondary cancer risk in the Brazilian population from left-sided breast-3D-CRT using MCNPX. *The British Journal of Radiology*. 2017 09;90:20170187.
8. Seniwat B., Fonseca T., Singh R. Monte-Carlo Modelling For Evaluation Of Two Different Calculation Algorithms. *Brazilian Journal of Radiation Sciences*. 2019 01;7.
9. Fonseca T., M. Bastos F., T. T. Figueiredo M., S. Souza L., C. Guimarães M., R. E. Silva C., *et al.* Estudo comparativo entre simulações de um sistema de monitoração ocupacional interna utilizando diferentes códigos de Monte Carlo. *Brazilian Journal of Radiation Sciences*. 2015 06;3:3-1.
10. Fonseca T. C. F., Antunes P. C. G., Belo M. C. L., Bastos F., Campos T. P., Geraldo J. M., *et al.* MCMEG: Intercomparison exercise on prostate radiotherapy dose assessment. *Radiation Physics and Chemistry*. 2019;p. 108295. Available from:<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X18311186>
11. Polo, I. O., Santos, W. S., Caldas, L. V. E. Characterization of an extrapolation chamber in beta radiation beams and Monte Carlo modelling. *Radiation Physics and Chemistry*, v. 171, p. 108746, 2020.
12. Neves, L., Silva, E., Perini, A., Maidana, N., Caldas, L. V. E. Characterization of an extrapolation chamber for low-energy x-rays: Experimental and Monte Carlo preliminary results. *Applied radiation and isotopes: including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine*, v. 70, p. 1388-91, 12 2011.
13. Faria F. P., Reynaldo S. R., Fonseca T., Lacerda M. A., Da Silva T. Monte Carlo simulation applied to the characterization of an extrapolation chamber for beta radiation dosimetry. *Radiation Physics and Chemistry*. 2015;116(1):226-230.
14. Team XMC. MCNP - A general Monte Carlo N-Particle transport code version 5. Novo Mexico; 2003
15. Booth T. E., Brown F. B., Bull J. S., Forster R. A., Goorley J. T., Hughes H. G., *et al.*; MCNP - a General Monte Carlo n-particle Transport Code, version 5. Novo Mexico; 1987.
16. McKinney G. W. MCNPX Users Manual Version 2.7.0; 2011.
17. PTW-Freiburg. Instruction Manual - Extrapolation chamber according to Böhm - Type 23392. Freiburg, Germany; 2002
18. cCastillo J. A. B. Caracterização de uma câmara de extrapolação e filmes radiocrômicos para verificação da coerência metrológica entre campos padrões de radiação beta. Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear. Belo Horizonte, Brasil; 2011
19. Shultis, J. K., Faw, R. E. An MCNP Primer. Technical report, Dept. of Mechanical and Nuclear Engineering, Kansas State University. Available from <https://www.nucleonica.com/wiki/images/6/6b/MCNPprimer.pdf>. 2008
20. Booth, T. Sample problem for variance reduction in MCNP. Los Alamos National Laboratory Report LA-10363-MS, 1985.
21. ICRP. Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations. Ann. icrp 38 ed. ICRP Publication 107; 2008.
22. DDEP, Decay Data Evaluation Project. Table of radionuclides, document CEA ISBN 92-822-2206-3. Available from: https://www.bipm.org/utils/common/pdf/monographieRI/Monographie_BIPM-5_Tables_Vol1.pdf. Page 141. 2004
23. BSS2 I. Operation Manual - Beta Secondary Standard 2; 2000.
24. Nuclitec E. Z. Available from: <https://www.ezag.com>.
25. ISO, International Organization for Standardization. Reference beta-particle radiation-Part 1: Methods of production. Geneve. ISO/FDIS 6980-1, 2006.
26. Schwarz A. L., Schwarz R. A., Carter L. L. MCNP/MCNPX Visual Editor Computer Code Manual; 2011.
27. Polo, I. O., Caldas L. V. E. Determination of transmission factors in beta radiation beams. *Applied Radiation and Isotopes*. 2018 02;136:82-86.
28. Antônio P. L., Xavier M., Caldas L. Determination of transmission factors in tissue using a standard extrapolation chamber. *Radiation Physics and Chemistry*. 2014 02;95:38-43.

Contato:

Lucas Fabrício de Araújo
 Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG)
 Av. Antônio Carlos, 6627 - Pampulha - Belo Horizonte
 - Bloco 4, Sala 2299 - CEP 31270-901
lucasfaraujo1@gmail.com