



Máster Universitario en Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería

Trabajo Fin de Máster

Caracterización computacional de un detector de germanio hiperpuro de rango extendido (HPGe- XtRa) con simulación Montecarlo y optimización con un algoritmo evolutivo

Autor:

Jonay González Guerra

Tutores:

Dr. Gabriel Winter Althaus

Dr. Jesús García Rubiano

Las Palmas de Gran Canaria, Julio 2014

ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN.....	3
1.1	Antecedentes	3
1.2	Objetivos generales	4
1.3	Estructura del documento	4
2.	MARCO TEÓRICO	6
2.1	Interacción de los fotones con la materia	6
2.1.1	Efecto fotoeléctrico.....	6
2.1.2	Efecto Compton.....	7
2.1.3	Creación de pares.....	8
2.2	Respuesta de un detector	9
2.2.1	Resolución en energía	11
2.2.2	Eficiencia del detector.....	12
2.2.3	Tiempo muerto	14
2.3	Detectores de Germanio.....	14
2.4	Simulación Montecarlo	19
2.5	Algoritmos evolutivos.....	19
3.	CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL	22
3.1	Descripción del equipo de espectrometría.....	22
3.2	Calibración en eficiencia.....	23
3.2.1	Determinación ab initio de la eficiencia mediante el programa LabSOCS.....	25
3.2.2	Determinación ab initio de la eficiencia mediante el código PENELOPE	26
3.2.2.1	Funcionamiento del código PENELOPE	26
3.2.2.2	Estructura del código de usuario (Programa MAIN).....	28
3.2.2.3	Determinación de la eficiencia de fotopicos mediante programa pencyl.exe	34
3.3	Procedimiento de caracterización computacional	37
3.3.1	Obtención de las eficiencias de referencia	37
3.3.2	Modelización del detector para la simulación mediante PENELOPE	40
3.3.3	Implementación conjunta del algoritmo de evolución diferencial y código PENELOPE.....	43
3.3.4	Ejecución y resultado de la caracterización.....	47
4.	VALIDACIÓN DEL PROCEDIMIENTO DE CARACTERIZACIÓN	53
4.1	Comprobación de la caracterización para distintas alturas de la muestra	53
4.2	Comprobación de la caracterización para recipientes de distintos diámetros.....	61
4.3	Comprobación de la caracterización a partir de muestras patrón	66
4.3.1	Descripción de las muestras patrón.....	66
4.3.2	Calibración en eficiencia ab initio del detector considerando las muestras patrón	66
4.3.3	Medición y comparación de actividades	73
5.	CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS	80
5.1	Conclusiones	80
5.2	Líneas futuras	81

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

La espectrometría de radiación gamma es una de las técnicas más utilizadas en la caracterización cualitativa y cuantitativa de las muestras con contenido radiactivo. Es una técnica no destructiva, que permite el análisis simultáneo de múltiples elementos, con requisitos mínimos en la preparación de las muestras y un balance muy favorable entre la información proporcionada y los costes asociados. Se ha convertido, por tanto, en una herramienta muy importante no sólo para las investigaciones de Física Nuclear, sino además, en áreas como la vigilancia radiológica del medio ambiente, el control radiológico de los alimentos, la caracterización radiológica de materiales y la vigilancia radiológica individual.

En las estimaciones de actividad mediante la espectrometría de radiación gamma es necesario conocer la eficiencia de detección del sistema en el pico de absorción total, la cual depende de la energía de los fotones, la composición química de la muestra, su densidad y la geometría de medida. Previamente a los trabajos de cuantificación se requiere, por tanto, realizar la calibración del sistema en relación con la eficiencia.

Ahora bien, la calibración experimental implica ejecutar medidas con fuentes de referencia cuyas actividades estén debidamente certificadas. Ello puede demandar un número considerable de fuentes patrón, para cada una de las energías, geometrías, materiales y densidades de las muestras a analizar. Por otro lado, la preparación de muestras de calibración idénticas a las muestras de interés puede ser un proceso complejo. Otro problema consiste en encontrar radionucleidos adecuados atendiendo a su energía, esquema de desintegración y período de semidesintegración.

Las dificultades relacionadas con la preparación de las fuentes de calibración, unidas a las limitaciones económicas y en ocasiones de seguridad radiológica para la adquisición sistemática del material radiactivo de referencia, hacen que sea recomendable contar con métodos de cálculo alternativos para la calibración en eficiencia.

En este sentido, el empleo de la simulación estocástica se ofrece como la solución más adecuada. La simulación mediante el método Montecarlo es una técnica establecida en las investigaciones de Física de las radiaciones ionizantes. Los primeros trabajos que dieron a conocer el método datan de los finales de la década de 1940, aunque su aplicación en la calibración de sistemas de espectrometría de radiación gamma se produjo a partir de la década siguiente. Para poder realizar esta calibración por medio de la simulación Montecarlo, es necesario conocer previamente las características físicas y geométricas del detector (caracterización). El desarrollo posterior del método, las precisiones realizadas paulatinamente a las secciones eficaces de interacción y el desarrollo vertiginoso de los medios informáticos, hacen que la simulación estadística sea una herramienta de extraordinario valor para la calibración de los sistemas de espectrometría gamma.

El presente Trabajo Fin de Master, dentro de los objetivos del master de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en la Ingeniería, se inserta también en de una de las líneas de investigación del Grupo de Investigación en Interacción Radiación-Materia (GIRMA) del Departamento de Física de la ULPGC, más en concreto con la de espectrometría gamma aplicada al estudio de la radiactividad medioambiental. Responde a la necesidad de dicho Grupo de contar con métodos eficaces de calibración en eficiencia de los detectores de que dispone.

1.2 Objetivos generales

El objetivo del TFM es desarrollar y validar un procedimiento de caracterización computacional de un detector de germanio hiperpuro de rango extendido (HPGe XtRa), con el objeto de que éste pueda ser posteriormente calibrado mediante métodos computacionales para cualquier geometría, material, etc. de la muestra.

1.3 Estructura del documento

A continuación, se expondrá un resumen de los diferentes apartados del presente documento resaltando los aspectos más destacados de los mismos.

En el apartado 2 se presenta una descripción de las características y el principio de funcionamiento de los detectores de radiación gamma, haciendo especial hincapié en los detectores de Germanio, y abordando los aspectos más relevantes de los procesos de interacción de este tipo de radiación con la materia. En este apartado también se realiza una breve introducción a los métodos numéricos empleados en el Trabajo Fin de Master.

En el apartado 3 se describe el equipo de espectrometría gamma que se ha utilizado para este trabajo, se explican los diferentes procedimientos de calibración en eficiencia que existen para el tipo de detector empleado, profundizando en la calibración ab initio mediante software basado en la simulación Montecarlo. Posteriormente se detalla el procedimiento de caracterización computacional objeto del presente trabajo, se muestra la mejor solución obtenida (características geométricas del detector que satisfacen de mejor manera las premisas contempladas), y se realiza una primera calibración mediante simulación Montecarlo para la muestra considerada durante la caracterización.

Una vez explicada y realizada la caracterización del detector, en el apartado 4 se valida el procedimiento de caracterización realizando calibraciones ab initio considerando distintas muestras (variando geometría y material).

Por último en el apartado 5 se establecen las principales conclusiones y se comentan las líneas futuras que nacen de este trabajo.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 Interacción de los fotones con la materia

Cuando la radiación γ penetra en la materia interacciona con la misma mediante distintos mecanismos. Un haz colimado de fotones que atraviesa una lámina de espesor x ve atenuada su intensidad incidente I_0 , en la forma:

$$I_x = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot x} = I_0 \cdot e^{-\frac{N \cdot \sigma}{A} \rho \cdot x} \quad [2.1]$$

Donde μ es el coeficiente de absorción o atenuación lineal, N es el número de Avogadro; A , la masa atómica o molecular del blanco, ρ la densidad del material y σ la sección eficaz por átomo. En realidad la sección eficaz σ es una magnitud compuesta por la adición de las probabilidades de varios fenómenos. Los tres mecanismos importantes de interacción desde el punto de vista de la medida de la radiación son: absorción fotoeléctrica, dispersión Compton y producción de pares.

2.1.1 Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico se produce cuando tiene lugar una interacción entre un fotón y un átomo, representado por uno de sus electrones suficientemente ligado. La consecuencia de una interacción fotoeléctrica es la emisión de electrones (fotoelectrones), debido a la absorción total de la energía del fotón por el electrón ligado. La energía de emisión de los fotoelectrones es:

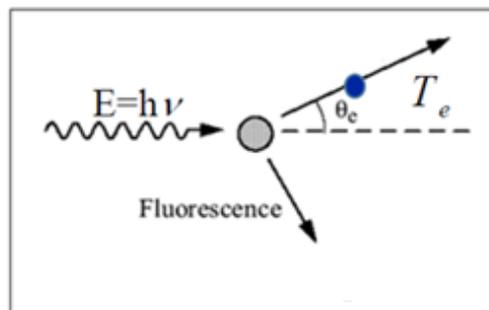
$$E_f = E_\gamma - E_b \quad [2.2]$$

Donde $E_\gamma = h\nu$ es la energía del fotón incidente y E_b la de ligadura del electrón al átomo. Para energías por encima del centenar de keV, el fotoelectrón se lleva la mayor parte de la energía original del fotón.

Además del fotoelectrón, la interacción crea una vacante en uno de los orbitales de la corteza del átomo con el que ha interactuado. Está vacante será ocupada

inmediatamente mediante la captura de un electrón del medio. Tras el reordenamiento electrónico de la corteza del átomo se emitirá radiación X característica, y electrones.

El efecto fotoeléctrico es el modo de interacción con la materia predominante para fotones X y γ de energía relativamente baja. Este proceso se ve favorecido en materiales de número atómico (Z) elevado.



$$E = h\nu = W_{\text{extracción}} + T_e$$

Figura 2.1 absorción fotoeléctrica.

2.1.2 Efecto Compton

El efecto Compton tiene lugar en la interacción de un fotón y un electrón débilmente ligado al átomo ($E_b \ll E_\gamma$), que se puede considerar como libre. Es el mecanismo de interacción predominante para las energías fotónicas típicas de los radionucleidos emisores gamma.

En la interacción Compton el fotón gamma incidente es dispersado con una pérdida parcial de su energía y en un ángulo θ con relación a su dirección inicial. En la figura 2.2 se representa esta interacción.

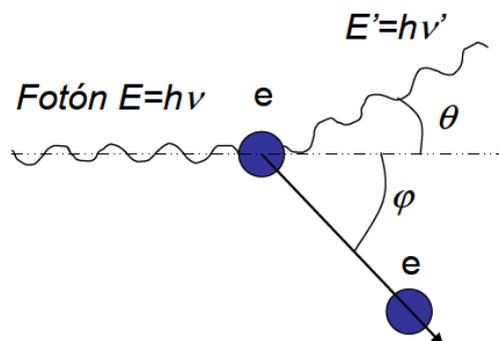


Figura 2.2 Interacción Compton.

De las leyes de conservación de la energía y la conservación del momento lineal se obtiene la ecuación que relaciona la energía del fotón dispersado con el ángulo de dispersión:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{v}' = \frac{h \cdot \nu}{1 + \frac{h \cdot \nu}{m_0 \cdot c^2} (1 - \cos \theta)} \quad [2.3]$$

Donde se puede observar que parte de la energía original se mantiene siempre en el fotón, incluso en el caso extremo de retrodispersión ($\theta = \pi$). La energía cinética del electrón emitido (E_c) puede estimarse entonces según:

$$E_c = h \cdot \nu - h \cdot \nu' = h \cdot \nu - \frac{h \cdot \nu}{1 + \frac{h \cdot \nu}{m_0 \cdot c^2} (1 - \cos \theta)} \quad [2.4]$$

2.1.3 Creación de pares

Si la energía del fotón gamma incidente es mayor de 1022 keV (el doble de la energía en reposo del electrón), el proceso de la producción de pares electrón-positrón es energéticamente posible. Sin embargo, la probabilidad de esta interacción es muy baja hasta que la energía del fotón gamma es de varios MeV. En la interacción (que se produce en el seno del campo eléctrico del núcleo atómico), el fotón gamma desaparece y es reemplazado por un par electrón/positrón. El exceso de energía por encima de 1.022 MeV necesario para crear el par se convierte en energía cinética distribuida entre el positrón y el electrón. Debido a que el positrón se aniquila después de desplazarse por el medio absorbente, se producen dos fotones de aniquilación de 511 keV, como producto secundario de este proceso de interacción. La probabilidad de producción de pares por núcleo varía, aproximadamente, con el cuadrado del número atómico del material absorbente.

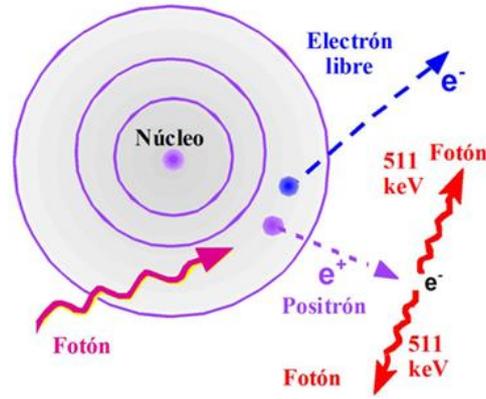


Figura 2.3 Creación de pares.

Para ilustrar la importancia relativa de estos procesos en función de la energía se ha representado en la figura 2.4 su dependencia en Plomo.

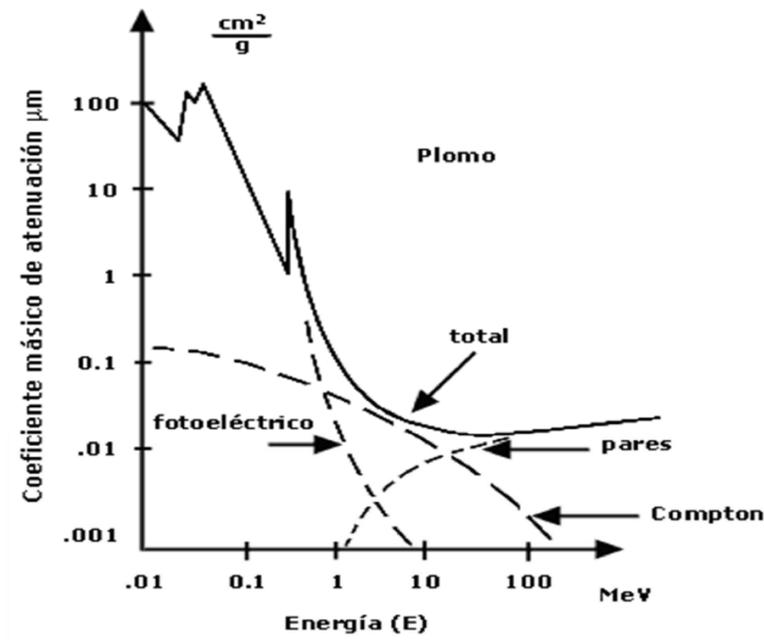


Figura 2.4 Coeficiente másico de atenuación ($\mu_m = \mu/\rho$) de rayos X y γ en plomo, según la energía del fotón. Se indica la contribución de cada uno de los tres efectos.

2.2 Respuesta de un detector

Para que un detector pueda ser empleado como un espectrómetro de radiación gamma se tiene que cumplir la condición de que la radiación incidente tenga una

probabilidad de interacción suficiente para producir, al menos, un efecto medible y, además, que el tamaño del detector sea lo suficientemente grande para que el escape de las partículas secundarias no sea significativo.

En la figura 2.5 se presenta un esquema general de un espectro que se puede obtener con un detector de radiación gamma. En la misma se aprecian las diferentes partes del espectro:

- A) Fotopico.
- B) Escape de rayos X característicos.
- C) El espectro continuo debido a dispersión Compton.
- D) Escape doble.
- E) El escape simple de un fotón tras una aniquilación.
- F) Pico de retrodispersión.
- G) Pico fotoeléctrico debido a rayos X emitidos por el blindaje.
- H) Pico de 511 keV debido a la emisión de fotones de aniquilación.

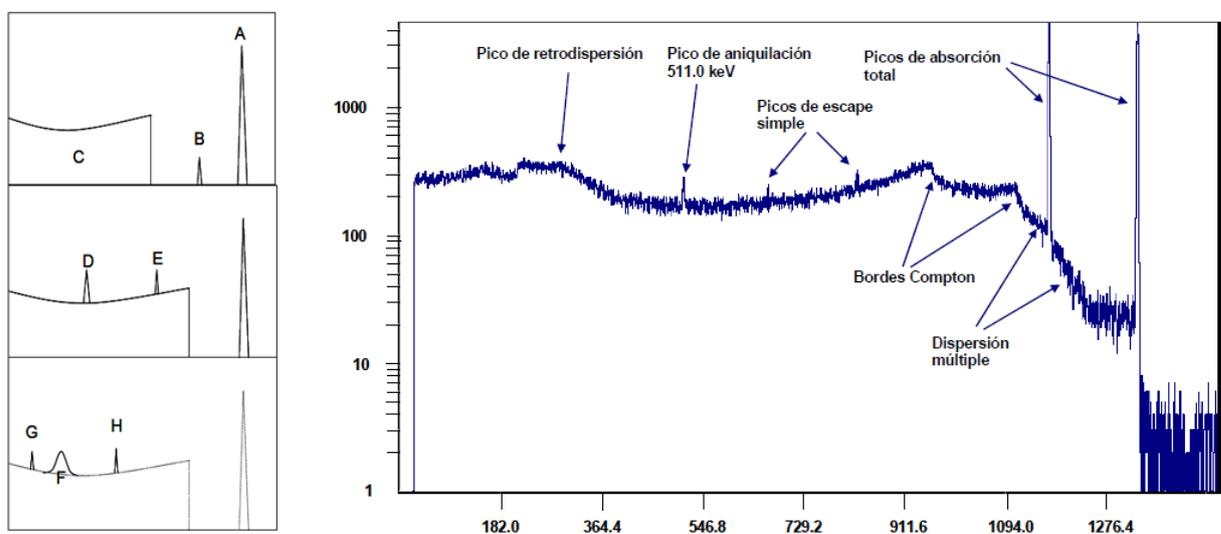


Figura 2.5 Espectro de energía esperado (izq.). Ejemplo de espectro en un detector de fotones (der.).

El pico de absorción total de energía o fotopico es la característica distintiva de todo espectro de amplitud de pulsos. Cuando un fotón interacciona por efecto fotoeléctrico se produce un fotoelectrón, que lleva la mayor parte de la energía del fotón gamma, junto con varios electrones de menor energía correspondientes a la absorción de la energía de enlace del fotoelectrón (absorción de los rayos X característicos del

material, producidos tras la emisión del fotoelectrón, o emisión de electrones Auger). Si no se produce ningún escape de rayos X o electrones del detector, la suma de la energía de todos estos electrones será igual a la del fotón gamma incidente.

La posición del pico de absorción total (ubicación en el eje x o número del canal central) y su intensidad (cantidad de cuentas en la unidad de tiempo) son los parámetros utilizados para determinar la energía y la intensidad de la radiación gamma, respectivamente.

2.2.1 Resolución en energía

Los detectores de espectrometría γ tienen como objetivo medir la distribución de energía de la radiación incidente. Si se irradia el detector con una fuente de radiación monocromática, se obtiene la denominada función de respuesta del detector para la energía empleada.

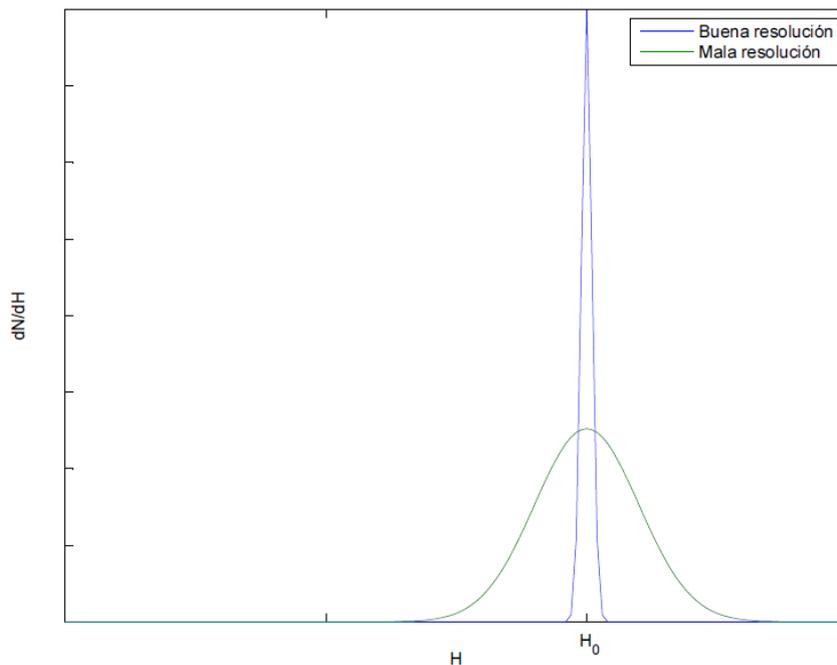


Figura 2.6 Ejemplo de dos funciones de respuesta de dos detectores, con resolución relativamente buena y relativamente pobre.

En la figura 2.6 se representa la respuesta de dos detectores que han registrado el mismo número de pulsos, es decir, el área encerrada por ambos picos es la misma. Aunque ambos picos están centrados en el mismo valor medio, H_0 , la anchura de la distribución con peor resolución es mucho mayor. Este hecho refleja que se han

registrado una gran cantidad de fluctuaciones entre pulso y pulso, aunque la cantidad de energía depositada por cada pulso es la misma que en el otro caso. Si se disminuyen la cantidad de fluctuaciones, la anchura de la distribución también disminuye y el pico se elevará cada vez más. Cuanto más se mejora la anchura de esta distribución, mayor es la capacidad del detector para resolver con detalle picos de energías muy próximas.

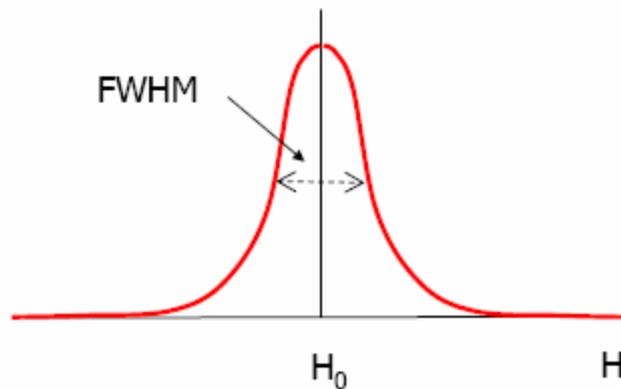


Figura 2.7 Esquema de la FWHM para un pico de energía H_0 .

Formalmente, se define la resolución en energía de un detector como:

$$R = \frac{FWHM}{H_0} \quad [2.5]$$

Donde FWHM (full width at half maximum), es la anchura de la distribución medida a la altura media del pico, y H_0 , el centroide del mismo (ver figura 2.7). Se trata de una magnitud adimensional que se suele expresar en porcentaje. Cuanto menor sea la resolución en energía del detector, mayor será su capacidad de distinguir dos radiaciones con energía muy próximas. Los detectores de radiación γ de semiconductor pueden llegar a tener resoluciones menores al 1%, frente al 5-10% de resolución que presentan los detectores centelleadores.

2.2.2 Eficiencia del detector

Se define la **eficiencia absoluta** (ϵ_{abs}) de detección como la relación entre número de pulsos registrados por el detector o cuentas (N_{reg}) y el número de fotones emitidos por la fuente de radiación (N_{fnt}). Viene dada por la expresión:

$$\epsilon_{abs} = \frac{N_{reg}}{N_{fnt}} = \frac{N_{reg}}{A(t) \cdot P_{\gamma} \cdot t \cdot m} \quad [2.6]$$

Donde:

$A(t)$ es la actividad específica del radionucleido durante la medida.

P_{γ} es la probabilidad de emisión de fotones correspondiente a dicho radionucleido.

t es el tiempo de adquisición del espectro.

m es la masa de la muestra.

La eficiencia absoluta depende de la energía de la radiación incidente, de las propiedades del detector, de la geometría y composición de la muestra, geometría y material del recipiente, y de la geometría del montaje del sistema de detección (distancia fuente-detector principalmente).

Se define también la **eficiencia intrínseca** (ϵ_{int}) como el número de pulsos registrados por el detector o cuentas, en relación al número de fotones que llegan al mismo (N_{inc}). La eficiencia intrínseca depende principalmente de la geometría y material detector y de la energía de la radiación incidente.

$$\epsilon_{int} = \frac{N_{reg}}{N_{inc}} \quad [2.7]$$

Ambas eficiencias están relacionadas a través de la expresión:

$$\epsilon_{int} = \epsilon_{abs} \cdot \frac{4\pi}{\Omega} \quad [2.8]$$

Ω es el ángulo sólido del detector visto desde la fuente.

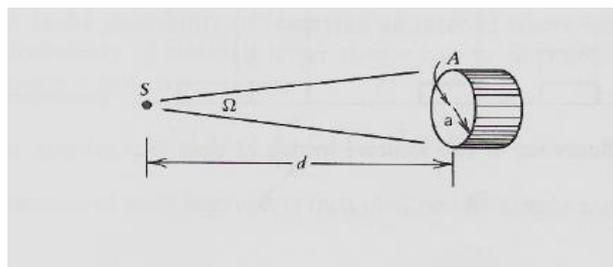


Figura 2.8 Esquema de la geometría fuente-detector.

Como ejemplo, para una fuente puntual localizada a lo largo del eje de un detector cilíndrico (figura 2.8), el ángulo sólido viene dado por:

$$\Omega = 2 \cdot \pi \cdot \left(1 - \frac{d}{\sqrt{d^2 + a^2}}\right) \quad [2.9]$$

Si $d \gg a$, se puede aproximar a:

$$\Omega \cong \pi \cdot \frac{a^2}{d^2} \quad [2.10]$$

2.2.3 Tiempo muerto

En cualquier sistema de detección, es necesario que transcurra un cierto tiempo entre dos sucesos consecutivos para que puedan ser registrados como procesos independientes. Esta separación temporal mínima entre sucesos se denomina tiempo muerto del detector. En unas ocasiones se debe al propio detector y en otras, a la electrónica asociada al mismo.

Dada la naturaleza aleatoria de los decaimientos radiactivos siempre existe la probabilidad de perder eventos verdaderos debido a que están separados muy poco respecto del evento precedente. Estas pérdidas por tiempo muerto son muy significativas a altas tasas de recuento y se deben tener en cuenta las correcciones pertinentes.

2.3 Detectores de Germanio

Los tipos de detectores más utilizados en espectrometría de radiación gamma son los de materiales centelleadores de cristales iónicos inorgánicos, como el NaI(Tl) y el CsI(Tl) y los de semiconductor, como los de Si(Li), Ge(Li), y HPGe. Dado que el presente trabajo consiste en la caracterización y calibración de un detector de Germanio, a continuación se describirá brevemente las principales características de este tipo de detectores.

Los detectores de Germanio mejoran a los de centelleo en la resolución de la energía, ya que aumentan el número de portadores de información, es decir, para este tipo de detectores, los fotoelectrones producidos en el proceso de interacción de la radiación con la materia. En los detectores de semiconductor los portadores de información son los pares electrón-hueco producidos tras interacción de la radiación en el material semiconductor. La ventaja de estos detectores es que la pequeña energía de ionización, de aproximadamente 3 eV en el caso del Germanio, permite un aumento considerable del número de cargas creadas para una energía depositada dada. El inconveniente es que algunos electrones de la banda de valencia pueden tener la suficiente energía térmica como para alcanzar la banda de conducción. Ello obliga a operar a bajas temperaturas para disminuir su número.

Para crear un campo eléctrico lo suficientemente grande que permita una recogida de carga eficiente, se debe aplicar una diferencia de potencial al semiconductor de cientos o miles de voltios. Incluso en ausencia de radiación ionizante, todos los detectores tienen una conductividad finita y, por tanto, en esta situación se observara una cierta corriente eléctrica denominada corriente de fuga. Las fluctuaciones en esta tienden a oscurecer la señal de corriente que aparece cuando se produce un suceso ionizante. De esta forma, los métodos para reducir esta señal son de gran importancia en el diseño de detectores de semiconductor.

Con este fin se construyen los detectores de Germanio con una estructura P-I-N, en los cuales se crea una región intrínseca (I) o zona de carga espacial libre de portadores, la cual es sensible a la radiación ionizante, en particular a la radiación X y γ . Cuando el detector es polarizado con un voltaje inverso, se extiende un campo eléctrico a lo largo de la región intrínseca aumentando la anchura de la misma. La región I posee una alta resistividad y, por tanto, la corriente de fuga es muy baja. En la figura 2.9 se presenta un esquema de la unión P-N. Si en esta zona se producen portadores (electrones y huecos) debido a la interacción de la radiación en la zona intrínseca, estos son rápidamente acelerados y captados por los electrodos de polarización. La carga creada, que es proporcional a la energía depositada en el detector por el fotón que interacciona, es convertida en un pulso de voltaje mediante un preamplificador sensible a carga.

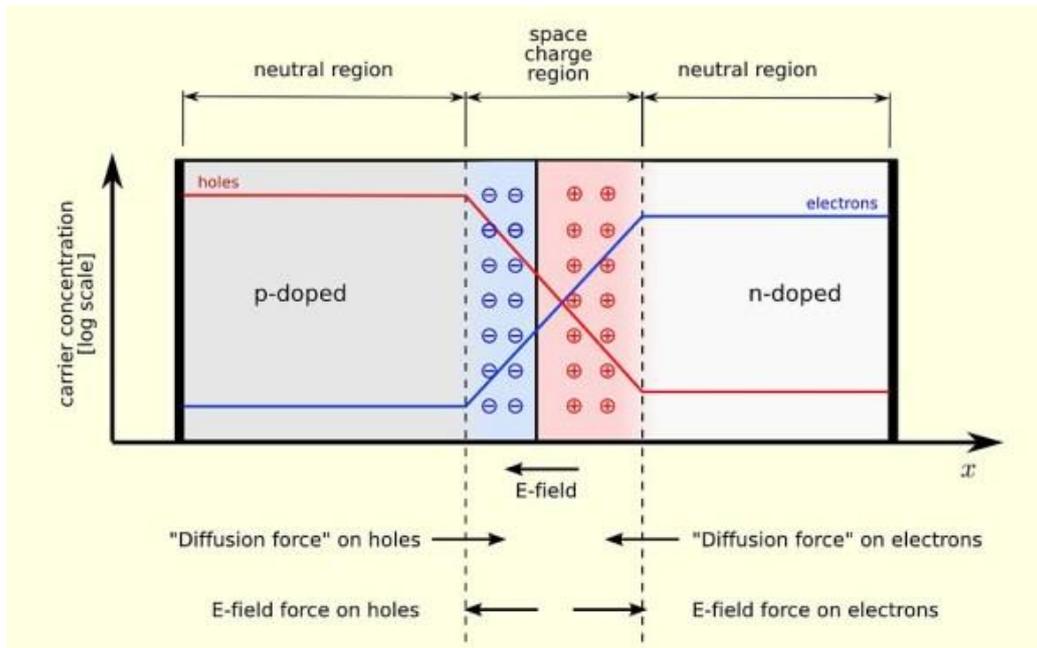


Figura 2.9 Esquema de una unión P-N.

La anchura de la zona libre de portadores de carga viene dada por:

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} V_{bi} \left(\frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)} \quad [2.11]$$

Donde V_{bi} es el potencial de contacto, N_A y N_D son las concentraciones de impurezas aceptoras y donadoras respectivamente, q la carga del electrón y ε la permitividad dieléctrica del material semiconductor. De forma que, para un voltaje dado, si se quiere conseguir un volumen útil lo suficientemente grande se debe reducir la concentración neta de impurezas. En los detectores fabricados con Germanio se han conseguido niveles de pureza muy grandes: del orden de 10^{10} átomos/cm³. Con este material se consiguen unos detectores con anchuras de carga espacial de 10 mm, y que reciben el nombre de detectores de Germanio hiperpuro: HPGe.

En función de la aplicación, existe una amplia variedad de tipos de detectores HPGe. Los más utilizados son los detectores planos, los detectores coaxiales, los detectores coaxiales de electrodo inverso, los detectores de rango extendido y los detectores de pozo. La figura 2.10 presenta un esquema de los diferentes tipos de detectores de Germanio de uso más común.

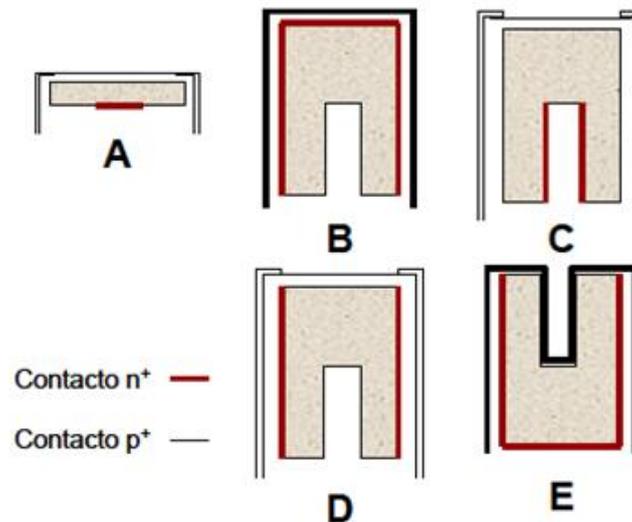


Figura 2.10 Diferentes tipos de detectores de Germanio hiperpuro.

- A) Detectores planos.** Los detectores de Germanio planos se utilizan para la medida de fotones de baja energía, en el rango de desde varios cientos de eV hasta unos 100 keV. Son cilindros con áreas de entre 0.5 y 20 cm^2 y espesores de entre 5 y 20 mm. Tienen un contacto n^+ en la cara posterior formado mediante la difusión de iones de Litio y un contacto p^+ fabricado normalmente por la implantación de una fina capa de iones de Boro.
- B) Detectores coaxiales.** El llamado normalmente HPGe coaxial es el detector de Germanio más utilizado. Básicamente está formado por un cilindro de Germanio con un contacto tipo n^+ en la superficie exterior y uno tipo p^+ en la superficie del pozo cilíndrico interior. El contacto tipo n se forma mediante la difusión de iones de litio, con un espesor de aproximadamente 0.5 mm; esto hace que se cree una capa inactiva en la que frena la mayor parte de los fotones por debajo de 40 keV, lo que hace que el detector no pueda trabajar por debajo de esas energías. El contacto de tipo p se crea mediante el implante de iones de Boro, aunque puede ser sustituido por una barrera superficial. El espesor de este contacto suele ser de aproximadamente $3 \mu\text{m}$. Los contactos forman una capa inactiva desde el punto de vista de la detección de fotones. Por tanto, el rango de energías útil de este tipo de detectores comienza en torno a 50 keV.

- C) Detectores coaxiales de electrodo inverso (REGe).** Su geometría es similar a la de los detectores coaxiales convencionales, con la diferencia de que los electrodos se sitúan con una configuración inversa; es decir, el contacto p^+ en la superficie exterior y el n^+ en la superficie interior. La ventaja es doble: por una parte, una mayor resistencia a daños por radiación; por otra, se dispone de una capa muerta de Germanio exterior mucho más fina (del orden de 0.2-0.3 μm). La ventana de la carcasa del detector está fabricada de un material ligero, como carbón epoxy o berilio, y es también muy fina (del orden de 0.5 mm). Esto hace posible, junto con la extremadamente fina capa muerta de Germanio, que el rango de medida sea muy amplio: desde 3 keV hasta 10 MeV.
- D) Detectores de Germanio coaxial de rango extendido (XRange).** Es un detector coaxial con una capa de Germanio inactivo en su superficie superior muy fina, de forma que extiende el rango de energías útiles hasta la región de 5 keV. Al ser un detector de tipo n^+ tiene las ventajas asociadas a este tipo de detectores (una mejor recogida de carga y debido a ello una resolución en energía mejor). El cilindro exterior (donde apoya el soporte del cristal) mantiene el contacto de Li que es mucho más robusto que el contacto p^+ (implante de iones de Boro) que tienen los detectores de electrodo invertido y que puede provocar en los últimos pequeños defectos. Como en el caso anterior, la ventana exterior suele estar fabricada de carbón epoxy o berilio.
- E) Detectores de pozo.** Los detectores de pozo permiten tener eficiencias muy altas para muestras muy pequeñas debido a que la fuente está virtualmente rodeada por el detector. Son detectores HPGe cilíndricos con un pozo cilíndrico perforado en su interior. La carcasa del detector suele ser de aleación de aluminio, con espesores en torno a 0.5 mm en el interior del pozo. El contacto interior del detector, normalmente construido por implantación de iones o de

barrera superficial, tendrá, de esta forma, un espesor despreciable frente al de la carcasa de aleación de aluminio.

2.4 Simulación Montecarlo

El Método Montecarlo es, en general, un procedimiento matemático que permite simular cualquier sistema físico, matemático, químico, biológico o de cualquier otra rama de la ciencia que tenga unas leyes capaces de poder ser traducidas a un lenguaje matemático.

El método posee una gran variedad de aplicaciones en distintos campos, como pueden ser: diseño de reactores nucleares, radioterapia contra el cáncer, densidad y flujo de tráfico, evolución estelar, econometría, pronóstico del índice de la bolsa, prospecciones en explotaciones petrolíferas, física de materiales, ecología, criptografía, valoración de cartera de valores, programas de ordenador, métodos cuantitativos de organización industrial.

Particularmente en la simulación de la interacción de la radiación con la materia, el método consiste esencialmente en la generación numérica de cascadas electrón-fotón mediante muestreo aleatorio a partir de distribuciones de probabilidad determinadas por las secciones eficaces de interacción. Una vez fijadas las características del experimento, la simulación detallada de un gran número de estas cascadas proporciona esencialmente la misma información que un experimento real y otra suplementaria que experimentalmente sería o bien imposible realizarla, o bien con un gran alto coste, tanto material como temporal.

2.5 Algoritmos evolutivos

Los algoritmos evolutivos son métodos de búsqueda de soluciones inspirados en postulados de la evolución biológica, de ahí que se denominen usualmente algoritmos bio-inspirados. Se basan en dinámica evolutiva de una población de entidades (se denominan indistintamente cromosomas o individuos en la comunidad científica de la computación evolutiva) que representan en cada iteración (símil al tiempo) un conjunto de posibles soluciones (soluciones candidatas a ser los óptimos buscados en la resolución de un problema). Ello se logra:

- Compitiendo entre sí los individuos en cada iteración del algoritmo (según operador de selección y en ocasiones parámetros asociados a intensificar más la presión selectiva), produciéndose así clones de las soluciones candidatas más prometedoras.
- Por creación a continuación de la selección, de diversificación bajo aplicación de operadores de recombinación, tradicionalmente denominados operadores de cruce (optativo en algunos de los algoritmos evolutivos, ejemplo no usados en de los denominados estrategias evolutivas).
- Y siempre con el uso necesario en todos los algoritmos evolutivos (para lograr convergencia a óptimos globales) de producción de diversificación bajo realización de pequeñas modificaciones a un porcentaje pequeño de las soluciones candidatas se obtienen así iterativamente soluciones candidatas mejores, es decir más próximas a óptimos globales a lo largo del tiempo (iteraciones del algoritmo).

Los Algoritmos Evolutivos, como algoritmos de búsqueda, únicamente requieren como información la función a maximizar o minimizar, y de los requerimientos a satisfacer las variables de decisión (ecuaciones de restricciones) evaluándose cuantitativamente ambas cosas en los puntos del espacio de búsqueda. Así, la convergencia no está vinculada a requisitos de continuidad, diferenciabilidad, convexidad, linealidad, etc. De ahí, en gran parte de la gran potencialidad de los mismos.

Los algoritmos evolutivos, y la computación evolutiva, son una rama de la inteligencia artificial. Son utilizados principalmente en problemas con espacios de búsqueda extensos y no lineales, en donde otros métodos no son capaces de encontrar soluciones en un tiempo razonable.

Evolución diferencial

La Evolución Diferencial (ED) es un método de optimización perteneciente a la categoría de computación evolutiva, aplicado en la resolución de problemas complejos. Al igual que otros algoritmos de esta categoría, la ED mantiene una población de soluciones candidatas, las cuales se recombinan y mutan para producir nuevos

individuos los cuales serán elegidos de acuerdo al valor de su función fitness. Lo que caracteriza a la ED es el uso de vectores de prueba, los cuales compiten con los individuos de la población actual a fin de sobrevivir.

ED se compone básicamente de 4 pasos:

- Inicialización
- Mutación
- Recombinación
- Selección

La inicialización se realiza al principio de la ejecución de la búsqueda, y los pasos de mutación-recombinación-selección se realizan repetidas veces, hasta que una condición de término sea satisfecha (número de generaciones, tiempo transcurrido, o calidad de solución alcanzada, entre otras).

3. CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL

3.1 Descripción del equipo de espectrometría

El equipo de espectrometría gamma utilizado en este trabajo consta de un detector coaxial de Germanio hiperpuro de rango extendido (XtRa) en configuración vertical Modelo GX3518 7500 SL de la marca Canberra y su electrónica y software asociados. Según las especificaciones del fabricante, la FWHM es de 0.875 keV para un fotopico de 122 keV y de 1.8 keV para un fotopico de 1.33 MeV. La principal ventaja de los detectores de rango extendido respecto al resto de detectores coaxiales es que permiten el estudio de las líneas de baja energía (por debajo de 150 keV) fundamentales para analizar algunos radionúclidos de interés ambiental como el ^{210}Pb (46.5 keV). Esto se debe a que posee un contacto (capa muerta) muy delgado en la superficie superior, y a que dispone de una delgada ventana de berilio o compuesto de carbono sobre dicho contacto (a una distancia de aproximadamente 5 mm), que amplía el rango útil de energía hasta los 3 keV. En la figura 3.1 se muestra una sección del detector y una curva de eficiencia tipo, en la que se aprecia la extensión en el rango de baja energía que proporciona el detector XtRa respecto a un detector coaxial convencional.

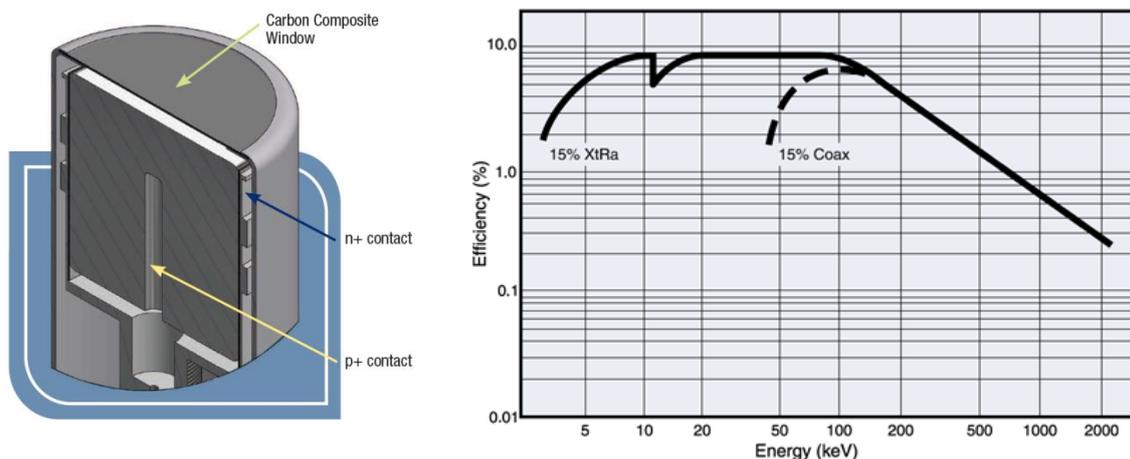


Figura 3.1 Detector de HPGe Coaxial XtRa (izquierda). Curva de eficiencia típica de un detector XtRa con ventana de berilio para una distancia entre detector y muestra de 2.5 cm (derecha).

La electrónica asociada consiste en un analizador multicanal DSA-1000 de Canberra, de 16000 canales basado en una tecnología avanzada de Canberra de procesamiento de señales digitales (DSP). El software de análisis y control es el

programa GENIE2000 de Canberra, el cual, permite realizar una adquisición de datos de alta calidad y todo tipo de análisis espectrometría gamma muy completos.

3.2 Calibración en eficiencia

La calibración en eficiencia puede realizarse exclusivamente para una serie de picos de interés, si se dispone de fuentes de actividad conocida de las energías seleccionadas, pero la técnica más utilizada es la determinación de una función empírica que relacione la eficiencia con la energía.

La determinación de la curva de eficiencia de un detector de germanio se realiza normalmente mediante el cálculo de una serie de eficiencias experimentales y, dado que el número de puntos experimentales disponible es siempre limitado, se hace necesario utilizar alguna técnica numérica para predecir el valor de la eficiencia para un valor cualquiera de la energía. En general se ajusta una forma funcional al conjunto de valores experimentales, teniendo en cuenta también, la incertidumbre asociada a la medida de la eficiencia. La forma funcional depende del detector, y para detectores coaxiales, como en el presente caso, se suele utilizar un polinomio logarítmico de grado n en energías y eficiencias (Debertin and R.G., 1988) del tipo:

$$\ln(\varepsilon) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot (\ln(E))^i \quad [3.1]$$

Existen dos alternativas prácticas para determinar la curva de calibración en eficiencia del detector:

- Calibración ab initio a partir del conocimiento de las características del cristal del detector (caracterización), de la evaluación de los procesos de interacción radiación-materia que tienen lugar y de los coeficientes de absorción y atenuación de los materiales constitutivos del detector. Este método de calibración en eficiencia requiere de la solución computacional de un modelo numérico siendo un método comúnmente empleado el de Montecarlo. Es un procedimiento relativamente reciente dado que requiere una gran potencia de cálculo.

- Calibración empírica: Es el método tradicional y consiste en utilizar fuentes de actividad conocida en un amplio rango de energías para medir el número de cuentas registradas en el fotopico de interés y determinar así, la eficiencia del fotopico. A partir de estas eficiencias calculadas, por ajuste se obtiene la función empírica de calibración $\epsilon(E)$.

Las dificultades relacionadas con la calibración experimental (preparación de las fuentes de calibración, limitaciones económicas, problemas de seguridad radiológica, etc.), hacen recomendable la primera alternativa, siendo necesario por tanto la caracterización del detector, es decir, conocer previamente con la suficiente exactitud los parámetros físicos y geométricos del detector.

En el presente caso, el detector ha sido caracterizado por Canberra para permitir su calibración en eficiencia para distintas geometrías mediante el software LabSOCS basado en el método de Montecarlo. La caracterización realizada por Canberra es un procedimiento para obtener la respuesta del detector para fuentes situadas en la proximidad del mismo, y sobre un rango de energía de los fotones de 45 keV-7 MeV. Este procedimiento tiene la ventaja de que en principio, una vez caracterizado el detector, puede ser utilizado para cualquier configuración geométrica fuente-detector y material de la muestra.

El principal inconveniente de esta caracterización es que requiere de varias semanas y su coste es elevado. Además la caracterización LabSOCS, se basa en las propiedades y dimensiones del detector HPGe en el momento que se caracteriza. Por lo tanto, cualquier cambio en las propiedades del cristal de Ge podría inducir un error en los cálculos de eficiencia LabSOCS. Por ejemplo, en los detectores de HPGe coaxiales, se sabe que el espesor de la capa muerta de Ge(Li) aumenta durante un período de varios años si el detector no se mantiene refrigerado a la temperatura adecuada. Una capa muerta más gruesa significaría una mayor atenuación de la radiación gamma, especialmente a bajas energías. Además, el aumento de dicha capa muerta, implica una reducción del volumen de Ge activo total, que causa una disminución en la eficiencia en todas las energías. Estos cambios en el tiempo se traducirán en un aumento gradual de la discrepancia entre la eficiencia real del detector y la calculada a partir de la caracterización. Todo esto implica que el detector deberá ser caracterizado nuevamente

al cabo del tiempo, con un elevado coste añadido y la inoperancia del detector durante varias semanas que esto conlleva.

Otro inconveniente de la caracterización Canberra es que no se ha desarrollado el procedimiento para caracterizar otro tipo de detectores, como ocurre en el caso de los detectores de pozo.

3.2.1 Determinación ab initio de la eficiencia mediante el programa LabSOCS

El LabSOCS es un software comercial basado en la simulación Montecarlo que permite, para detectores caracterizados, generar calibraciones por software para una amplia gama de geometrías y de composición de las muestras y recipientes. En la figura 3.2 se muestra un diagrama de flujo del proceso de calibración utilizando LabSOCS.

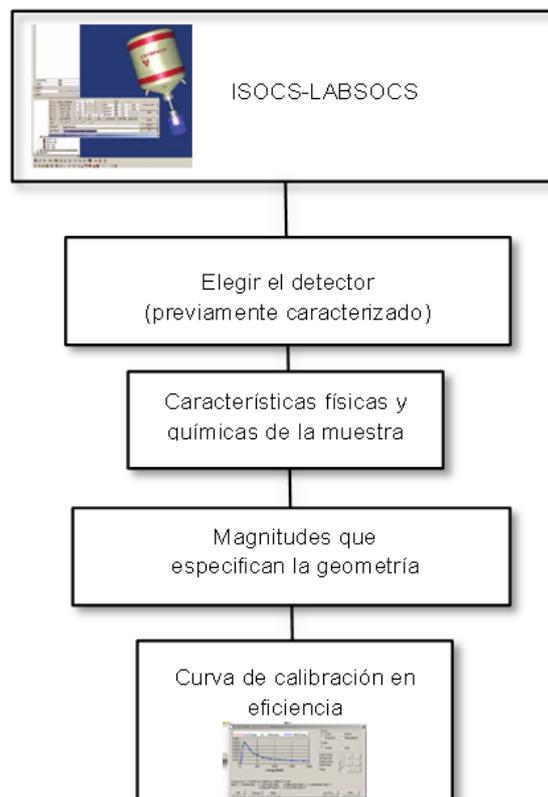


Figura 3.2 Diagrama de flujo del procedimiento de calibración mediante el programa LabSOCS para detectores caracterizados.

El LabSOCS junto con el software de análisis de espectros GENIE-2000, forman un sistema integrado de calibración y análisis que funciona sobre un ordenador personal con sistema operativo Windows, lo que los hace particularmente sencillos de utilizar.

Las características del detector se introducen en este programa a partir de unos ficheros de caracterización obtenidos por Canberra, en los cuales no es posible conocer (y por lo tanto tampoco cambiar) los parámetros principales que definen el detector. Este es el principal inconveniente de este software, y el motivo por el cual no ha sido empleado como software Montecarlo durante la caracterización computacional del detector. Para dicha caracterización computacional se ha empleado el código PENELOPE, el cual será descrito en el siguiente apartado.

No obstante debido a las nombradas dificultades relacionadas con la calibración experimental, se ha decidido tomar las eficiencias obtenidas mediante LabSOCS, como valores de referencia para la caracterización computacional mediante PENELOPE.

3.2.2 Determinación ab initio de la eficiencia mediante el código PENELOPE

PENELOPE es un código de simulación Montecarlo desarrollado por F. Salvat, J.M. Fernández-Varea, E Acosta y J. Sampau de la Universidad de Barcelona para la simulación del transporte de electrones y fotones (Salvat, et. al., 2006). Es bastante más complejo de utilizar que el LabSOCS, pero permite al usuario un mayor control sobre los parámetros del modelo numérico, permitiendo, a diferencia del LabSOCS, cambiar la geometría y materiales del detector, algo imprescindible para la caracterización computacional que se pretende realizar en este trabajo.

3.2.2.1 Funcionamiento del código PENELOPE

PENELOPE simula el transporte acoplado de electrones y fotones en una estructura de materiales arbitraria en un amplio rango de energía, desde unas pocas centenas de eV hasta 1 GeV. Según el manual del código de simulación Montecarlo MCNP (Briesmeister, 2000) un fotón que viaja en aluminio pierde energía de 0.5 MeV a 0.0625 MeV en un promedio de 10 colisiones; en cambio un electrón en las mismas condiciones requiere alrededor de 10^5 interacciones. Por lo tanto el transporte de fotones

se simula mediante un esquema detallado estándar, mientras que los electrones y positrones siguen un procedimiento mixto que combina la simulación detallada en el caso de colisión “fuerte” con una condensada en las colisiones “débiles”. Esto es debido a que, para el caso de positrones y electrones, realizar un cálculo análogo al de los fotones, donde se calcula cada evento o colisión, daría lugar a un tiempo de simulación PENELOPE impracticable. Las partículas secundarias emitidas con energía inicial mayor que la energía de absorción son almacenadas y simuladas después de la finalización de cada trayectoria primaria. Las partículas secundarias son producidas en interacciones directas (colisiones inelásticas fuertes, emisión Bremsstrahlung fuerte, aniquilación de positrones, dispersión Compton, absorción fotoeléctrica y producción de pares) y como radiación fluorescente (rayos X característicos y electrones Auger).

Un paquete geométrico, llamado PENGEOM, permite la generación aleatoria de una serie de electrones-fotones en un sistema de materiales que consiste en cuerpos homogéneos limitados por superficies cuadráticas (planos, esferas, cilindros, etc.). PENELOPE está formado por una serie de subrutinas escritas en FORTRAN, donde se simula el proceso de la interacción, necesitando un programa principal (MAIN) que controle todo el proceso y la evolución de cada suceso. El PENELOPE efectúa la parte más larga del trabajo de simulación, pero el usuario debe escribir su propio programa MAIN, con geometrías arbitrarias, magnitudes y cantidades de interés.

Los ejemplos de programas principales más empleados son:

- a. El programa principal penslab.f para el transporte de partículas en una losa.
- b. El programa principal pencyl.f para transporte de partículas en estructuras cilíndricas.
- c. El programa principal genérico penmain.f para el transporte de partículas en geometrías regulares

La Figura 3.3 muestra una estructura de archivos necesaria para una simulación usando el código PENELOPE. Los archivos en letras mayúsculas forman parte del paquete PENELOPE y los que están en letra cursiva deben ser usados o creados por el usuario. El cuadro superior de la figura muestra los archivos necesarios para la construcción del archivo ejecutable que inicia y controla la simulación. Estos son, además del main.f:

- TIMER.f: paquete de subrutinas de tiempo, basado en procedimientos de Fortran 95-97 o 90.
- PENELOPE.f: Contiene las sub-rutinas de simulación del transporte acoplado de fotones y electrones en un medio sin fronteras.
- PENGEOM.f: es un conjunto de subrutinas para el seguimiento de partículas a través de geometrías regulares modulares (el sistema maneja por encima de 10000 superficies y 5000 cuerpos).

El archivo main.exe necesita la información de entrada contenida en los archivos entrada.in, geometria.geo y material.mat, para realizar la simulación y que se genere el archivo salida.dat.

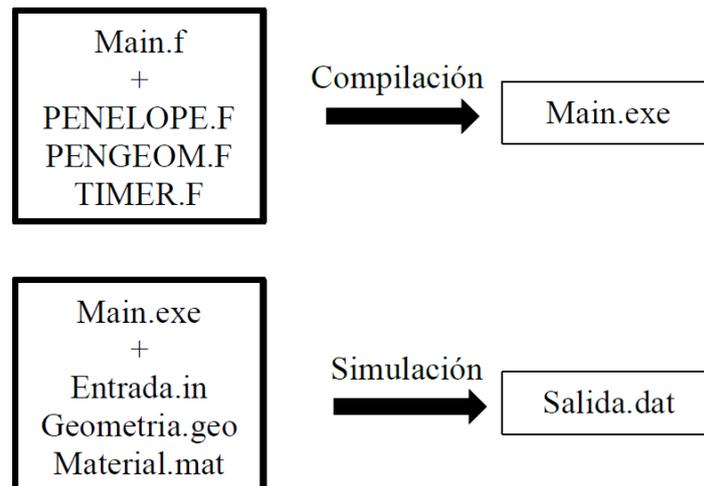


Figura 3.3 Estructura de archivos para la simulación del código PENELOPE. Arriba creación del archivo ejecutable, Abajo-archivos para la simulación.

3.2.2.2 Estructura del código de usuario (Programa MAIN)

PENELOPE debe ser complementado con un código de usuario MAIN que controla la evolución de eventos simulados, almacena las cantidades de interés y calcula los valores medios al final de la simulación. La conexión entre PENELOPE y el programa principal MAIN es realizada a través de un bloque común COMMON/TRACK/ E, X, Y, Z, U, V, W, WGHT, KPAR, IBODY, MAT, ILB (5), que contienen las siguientes variables de estado de la partícula:

- KPAR: Tipo de partícula (1: electrón; 2 fotón, 3 positrón).
- E: Energía de la partícula (cinética para electrones y positrones) en eV.
- X, Y, Z: Coordenadas de posición (cm).
- U, V, W: cosenos directores de movimiento.
- WGHT: Almacena el peso asociado a la partícula cuando se usa reducción de varianza.
- IBODY: Identifica diferentes cuerpos y materiales con geometrías complejas.
- MAT: Material donde se mueve la partícula (un cuerpo identificado en IBODY).
- ILB (5): Vector auxiliar con 5 índices que indican el origen de la partícula cuando ésta es secundaria. Es importante la consideración de contribuciones parciales de partículas para un proceso dado.

Una partícula que se mueve en un material M se asume que es absorbida cuando su energía sea menor que un valor EABS (KPAR, M) especificado por el usuario. El algoritmo de transporte para electrones y positrones en cada material M es controlado por los siguientes parámetros de simulación:

- C1 (M): Deflexión angular media, producida por dispersión elástica múltiple a lo largo del camino libre medio entre eventos elásticos fuertes consecutivos. C1 debe estar en el orden de 0.05; su máximo valor permitido es 0.2.
- C2 (M): Perdida fraccional media de energía entre eventos elásticos fuertes consecutivos. Usualmente un valor de C2 de 0.05 es adecuado hasta un valor máximo permitido de 0.2.
- WCC: Energía inelástica de corte W_{cc} en eV, para colisiones fuertes.
- WCR (M): Energía de corte W_{ce} en eV para emisiones de radiación de frenado fuertes.

Estos parámetros determinan la exactitud y velocidad de la simulación. Para garantizar exactitud C1 y C2 deben tener valores pequeños (del orden de 0.01). Con valores mayores de estas variables, la simulación es más rápida pero disminuye la exactitud. Las energías de corte WCC y WCR influyen principalmente la distribución

de energía simulada. La simulación es más rápida con valores de energía de corte mayores, si estos valores se hacen más grandes, la distribución de energía se verá distorsionada. En la práctica las distribuciones de energía no varían para diferentes valores de WCC y WCR, cuando estos son menores que el incremento de energía usado en la distribución. Así, la resolución de energía deseada determina el valor máximo permitido de energías de corte.

El paquete de simulación se inicia desde el programa MAIN con el comando CALL PEINIT (EPMAX, NMAT, IRD, IWR, INFO).

La subrutina PEINIT lee los archivos de datos de diferentes materiales, avala las propiedades de dispersión relevantes y prepara las tablas de cantidades dependientes de energía que son usadas durante la simulación. Los argumentos de entrada son:

- EPMAX: Energía máxima de las partículas simuladas.
- NMAT: Número de los diferentes materiales (menor o igual a MAXMAT).
- IRD: Unidad de entrada de datos.
- IWR: Unidad de salida de datos.
- INFO: Determina la cantidad de información que es escrita en la unidad de salida.

La subrutina PEINIT necesita también de energías de absorción EABS (KPAR, M) y de los parámetros de simulación C1 (M), C2 (M), WCC (M) y WCR (M). Se puede entregar diferentes valores de estos parámetros para diferentes materiales, o se puede aumentar las velocidades de simulación en regiones de menor interés. Esta información se introduce en la subrutina PEINIT a través del bloque común COMMON /CSIMPA /EABS(3, MAXMAT), C1(MAXMAT), C2(MAXMAT), WCC(MAXMAT), WCR(MAXMAT).

El código PENELOPE está estructurado de tal manera que el camino de una partícula es generado como una secuencia de segmentos de caminos. Al final de cada segmento, la partícula sufre una interacción con el medio donde pierde su energía, cambia su dirección de movimiento y en ciertos casos produce partículas secundarias. La simulación de electrones y fotones se hace llamando las siguientes subrutinas:

- CLEANS (DSMAX, DS): Inicia el stock secundario.
- START: Inicia los parámetros de la partícula. Debe ser llamada siempre antes de iniciar una simulación de un camino (primario o secundario) o antes de que éste atraviese una interface. Solo funciona para electrones y positrones, en fotones esta subrutina no tiene efecto.
- JUMP (DSMAX, DS): Determina la longitud del segmento del camino hasta la siguiente interacción.
- KNOCK (DE, ICOL): Simula un evento de interacción. Calcula la nueva energía y dirección de movimiento después de la interacción y almacena el estado inicial de las partículas secundarias cuando son generadas. Sus argumentos de salida son:
 - DE: Deposita la energía en el curso del evento.
 - ICOL: Clase de evento que ha sido simulado de acuerdo a las convenciones que se muestran en la siguiente tabla:

ICOL	electrons (KPAR=1)	photons (KPAR=2)	positrons (KPAR=3)
1	artificial soft event (random hinge)	coherent (Rayleigh) scattering	artificial soft event (random hinge)
2	hard elastic collision	incoherent (Compton) scattering	hard elastic collision
3	hard inelastic collision	photoelectric absorption	hard inelastic collision
4	hard bremsstrahlung emission	electron-positron pair production	hard bremsstrahlung emission
5	inner-shell impact ionisation		inner-shell impact ionisation
6			annihilation
7	delta interaction	delta interaction	delta interaction
8	auxiliary interaction	auxiliary interaction	auxiliary interaction

Tabla 2.1 Número de código (ICOL) para los diversos eventos de interacción.

- SECPAR (LEFT): establece el estado inicial de la partícula secundaria y es removida a un estado secundario. El valor de salida LEFT es un número de partículas secundarias que permanecen en el estado al momento de la llamada.

- STORES (E,X,Y,Z,U,V,W,WGHT,KPAR,ILB): Almacenan la partículas acumuladas en el estado secundario. La secuencia de llamadas para generar un camino aleatorio es independiente del tipo de partícula que está siendo simulada.

La simulación del transporte de radiación en PENELOPE, que se esquematiza en la Figura 3.4, se inicia al llamar al archivo PEINIT para dar inicio a PENELOPE. Se genera una nueva partícula y para el transporte de la misma se siguen los siguientes pasos:

- (i) Se determina el estado inicial de la partícula asumiendo valores de las variables de estado KPAR, E, posición $\hat{r}(x,y,z)$ y la dirección de movimiento $\hat{d}(u,v,w)$. Se especifica el cuerpo o material donde la partícula se mueve a través de IBODY y MAT, respectivamente. Aquí también se pueden definir los valores de WGHT e ILB.
- (ii) Para inicializar el estado secundario se llama a CLEANS.
- (iii) Para iniciar los parámetros de la partícula se llama a START.
- (iv) Para determinar la longitud DS del próximo segmento del camino, DS nunca excederá el valor de entrada DSMAX, se llama a JUMP (DSMAX, MS).
- (v) Se calcula la posición del próximo evento de la siguiente manera:
 - Si en la trayectoria ha tocado la interface, la partícula para donde la encuentra y disminuye la longitud de DS. Para un nuevo material (detrás de la interface) se redefinen las variables IBODY y MAT.
 - Cuando la partícula escapa del sistema la simulación del camino termina, se incrementa el contador y se sigue al paso (vii).
 - Regresa al paso (iii).
- (vi) Para simular el siguiente evento se llama a KNOCK (DE, ICOL).
 - Si la energía es menor que EABS (KPAR, MAT), se finaliza la trayectoria, se incrementa el contador de la simulación y se va al paso (vii).
 - Se regresa al paso (iv).

- (vii) Para comenzar la trayectoria de una partícula secundaria (esta partícula es automáticamente movida del stock), llama a SECPAR (LEFT).
- Si $LEFT > 0$ vuelve al paso (iii). El estado inicial de una partícula secundaria ya se ha establecido.
 - Si $LEFT = 0$ la simulación mostrada producida por la partícula primaria está completa. Vaya a (i) para generar una partícula primaria (o la simulación termina después de considerar un número suficiente de caminos).

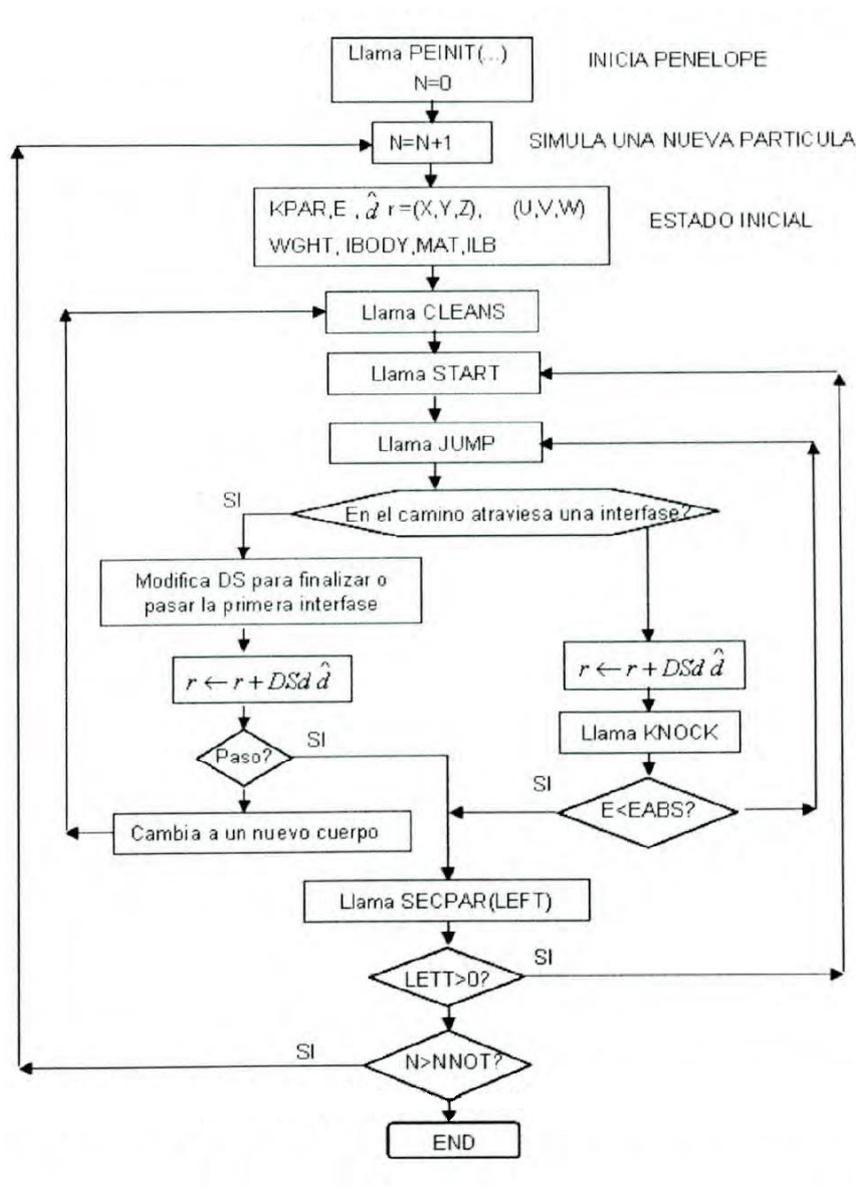


Figura 3.4 Diagrama de flujo del código PENELOPE.

3.2.2.3 Determinación de la eficiencia de fotopicos mediante programa pencyl.exe

Dada la geometría cilíndrica del detector, en este trabajo se ha empleado como main el programa pencyl.f, creado para la simulación del transporte de partículas en geometrías cilíndricas. Tal como se explicó anteriormente, compilando este programa principal junto con las subrutinas PENELOPE.f, PENGEOM.f y TIMER.f se genera el ejecutable pencyl.exe, el cual será empleado para los cálculos de las eficiencias de fotopicos en este trabajo.

En la figura 3.5 se ilustra un ejemplo de archivo de entrada.in, necesario para realizar la simulación Montecarlo, en el que se debe definir principalmente la geometría del detector, los cuerpos activos (zonas del detector donde se registra la radiación ionizante que llega hasta él), la geometría muestra, los materiales que los conforman, tipo de radiación que emite la muestra (γ o β) y las energías correspondientes, la duración de la simulación, etc.

```

TITLE Detector HPGe Xtra con bote cilindrico
equivalente a bote de orina y agua destilada.

GSTART >>>>>> Beginning of the geometry
definition list.
LAYER -5.770 -5.270 1
CENTRE 0.000 0.000
CYLIND 3 0.000 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER -5.270 -1.530 2
CYLIND 3 0.000 0.313
CYLIND 1 0.313 2.926
CYLIND 2 2.926 2.976
CYLIND 3 2.976 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER -1.530 -0.565 3
CYLIND 1 0.000 2.926
CYLIND 2 2.926 2.976
CYLIND 3 2.976 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER -0.565 -0.554 4
CYLIND 1 0.000 2.925
CYLIND 2 2.925 2.976
CYLIND 3 2.976 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
.
.
LAYER -0.240 -0.229 34
CYLIND 1 0.000 2.665
CYLIND 2 2.665 2.716
CYLIND 3 2.716 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER -0.229 -0.219 35
CYLIND 1 0.000 2.580
CYLIND 2 2.580 2.630
CYLIND 3 2.630 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER -0.219 0.500 36
CYLIND 3 0.000 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER 0.500 0.550 37
CYLIND 5 0.000 3.500
CYLIND 4 3.500 3.650
LAYER 0.550 0.650 38
CYLIND 6 0.000 2.495
LAYER 0.650 3.150 39
CYLIND 7 0.000 2.395
CYLIND 6 2.395 2.495
LAYER 3.150 7.400 40
CYLIND 3 0.000 2.395
CYLIND 6 2.395 2.495
GEND <<<<<<< End of the geometry definition
list.

.
>>>>>> Source definition.
SKPAR 2 [Primary particles: 1=electron,
2=photon, 3=positron]
gamma-ray spectrum (no sum effect).
SPECTR 45e3 0.1111111 [E bin: lower-
end and total probability]
SPECTR 45e3 1.0e-35
SPECTR 62e3 0.1111111
SPECTR 62e3 1.0e-35
SPECTR 85e3 0.1111111
SPECTR 85e3 1.0e-35
SPECTR 110e3 0.1111111
SPECTR 110e3 1.0e-35
SPECTR 135e3 0.1111111
SPECTR 135e3 1.0e-35
SPECTR 180e3 0.1111111
SPECTR 180e3 1.0e-35
SPECTR 270e3 0.1111111
SPECTR 270e3 1.0e-35
SPECTR 450e3 0.1111111
SPECTR 450e3 1.0e-35
SPECTR 630e3 0.1111111
SPECTR 630e3 1.0e-35
SPECTR 900e3 0.1111111
SPECTR 900e3 1.0e-35
SPECTR 1260e3 0.1111111
SPECTR 1260e3 1.0e-35
SPECTR 1800e3 0.1111111
SPECTR 1800e3 -1
STHICK 2.500000

SRADII 0.0 2.395000
SPOSIT 0 0 1.900000
[Coordinates of the source centre]
SCONE 0 0 180
[Conical beam; angles in deg]
.
>>>>>> Material data and simulation
parameters.
MFNAME HPGe.mat
MFNAME Ge(Li).mat
MFNAME Nitrogeno.mat
MFNAME Aluminio.mat
MFNAME Carbon_composite.mat
MFNAME Polypropylene.mat
MFNAME agua.mat
.
>>>>>> Counter array dimensions and
pdf ranges.
NBZ 50 [No. of bins
for the Z-coordinate]
NBR 50 [No. of radial bins]
.
>>>>>> Energy-deposition detectors (up
to 25).
ENDETC 0.0e0 2e6 1000 [Energy
window and number of bins]
EDBODY 2 2 KL,KC [Active body;
one line for each body]
EDBODY 3 1
EDBODY 4 1
EDBODY 5 1
EDBODY 6 1
EDBODY 7 1
EDBODY 8 1
EDBODY 9 1
EDBODY 10 1
EDBODY 11 1
EDBODY 12 1
EDBODY 13 1
EDBODY 14 1
EDBODY 15 1
EDBODY 16 1
EDBODY 17 1
EDBODY 18 1
EDBODY 19 1
EDBODY 20 1
EDBODY 21 1
EDBODY 22 1
EDBODY 23 1
EDBODY 24 1
EDBODY 25 1
EDBODY 26 1
EDBODY 27 1
EDBODY 28 1
EDBODY 29 1
EDBODY 30 1
EDBODY 31 1
EDBODY 32 1
EDBODY 33 1
EDBODY 34 1
EDBODY 35 1
.
>>>>>> Dose and charge distributions.
DOSE2D 3 1 50 50 [Tally 2D dose and charge
dists. in body KL,KC]
.
>>>>>> Job properties
RESUME dump.dmp [Resume from
this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump.dmp [Generate
this dump file, 20 chars]
DUMPP 60
[Dumping period, in sec]
.
RSEED 1 1 [Seeds of the
random-number generator]
NSIMSH 2.0e9 [Desired number
of simulated showers]
TIME 95 [Allotted simulation
time, in sec]
.
END [Ends the
reading of input

```

Figura 3.5 Ejemplo de archivo xtra.in.

La geometría tanto del detector como de la muestra se construye mediante cuerpos (con forma de anillos cilíndricos) definidos en una lista por su layer (capa o estrato), en la que se indica la cota inferior y superior del layer y su etiqueta (necesario para la definición de los cuerpos activos), las coordenadas del centro de los cuerpos que se encuentran en dicho layer (en el caso de ser común a todos los layer solo es necesario definirlo en el primero) y, la etiqueta del material (definido más abajo en el fichero de entrada), radio interno y radio externo del cuerpo. Por lo tanto la lista de definición de la geometría tiene la siguiente forma:

LAYER	$Z_{inferior}$	$Z_{superior}$	Etiqu _{layer}
CENTRE	Coord x	Coord y	
CYLIND	Etiqu _{material}	R_{int}	R_{ext}

Una vez definida la geometría, se define el tipo de radiación que emite la muestra, su energía y la probabilidad de emisión.

El siguiente paso es definir los materiales. Los ficheros material.mat deben estar en el mismo directorio que el main.exe, y deberán haber sido creados mediante el programa material.f, incluido en el paquete PENELOPE, en el que se generan los materiales introduciendo su composición centesimal y a partir de una base de datos denominada pendbase. En esta base de datos se encuentra la información necesaria de los todos los elementos de la tabla periódica y algunos compuestos como agua, plásticos, etc. El orden en el que se presentan los materiales coincide con la numeración de la etiqueta del material situada a continuación de la palabra cylind, en la definición de la geometría explicada anteriormente.

Una vez definido el archivo de entrada, al que se le ha denominado xtra.in, se ejecuta la simulación Montecarlo mediante la sentencia en MS-DOS: "pencil.exe<xtra.in". Al finalizar la simulación (de duración definida por el usuario en el fichero de entrada) se genera un fichero salida.dat en el que se encuentran los siguientes datos distribuidos en tres columnas: las energías de los fotopicos, las eficiencias obtenidas de la simulación y la incertidumbre.

3.3 Procedimiento de caracterización computacional

En este trabajo se ha establecido un procedimiento de caracterización computacional consistente en la búsqueda de las características geométricas del detector que minimicen la diferencia entre unas eficiencias de fotopico de referencia y las calculadas mediante el código PENELOPE, empleando para ello un algoritmo de evolución diferencial.

El motivo por el que se ha escogido emplear este algoritmo evolutivo es su gran velocidad de convergencia al óptimo en problemas con una sola función objetivo. Posee una gran capacidad de exploración, minimizando la obtención de óptimos locales. Además, el desempeño de este algoritmo depende del control de pocos parámetros, lo cual facilita su uso. (Rainer-Storn and Kenneth-Price, 1997).

3.3.1 Obtención de las eficiencias de referencia

El procedimiento desarrollado está ideado para caracterizar el detector tomando como referencia unas eficiencias de fotopicos obtenidas experimentalmente (de la calibración empírica). No obstante, debido a las dificultades que ello conlleva (fundamentalmente limitaciones económicas), se ha decidido emplear como referencia las eficiencias calculadas mediante el software LabSOCS. Obviamente esto no tiene ninguna utilidad práctica (ya que para la calibración ab initio mediante LabSOCS es necesario haber enviado el detector a realizar la caracterización de Canberra, la cual se pretende suplantar), pero si a la hora del desarrollo y validación del procedimiento.

Para el cálculo de eficiencias mediante LabSOCS es necesario seleccionar el detector, geometría y material del recipiente donde se almacena la muestra, material y geometría (básicamente altura) de la muestra, y las energías para las cuales se quiere calcular la eficiencia de fotopico.

Originalmente se pensó emplear un recipiente usual en la espectrometría de radiación gamma, el “bote de orina” de estructura troncocónica. Dado que para conseguir la mejor caracterización posible es necesario reproducir con gran exactitud los materiales y geometría tanto del recipiente como de la muestra en el PENELOPE, se ha desechado esta idea pues en el PENELOPE solo se pueden emplear muestras

puntuales o cilíndricas. En su lugar se ha escogido un vaso cilíndrico lo más similar posible al bote de orina. El criterio que se ha seguido para escoger este vaso cilíndrico equivalente es que, para una altura de 25 mm de muestra, ésta ocupe el mismo volumen en el vaso equivalente que en el bote de orina (45 ml). La necesidad de emplear un vaso equivalente al bote de orina nace de que a la hora de validar el procedimiento de caracterización, se han realizado una serie de análisis espectrométricos de unas muestras certificadas, cuya adquisición de datos (espectro) se ha realizado a partir de la geometría de “bote de orina”, con 25 mm de altura.

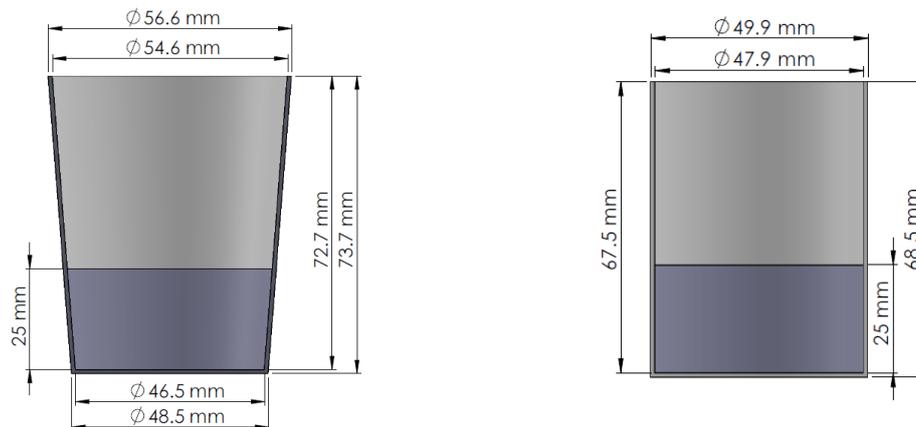


Figura 3.6 Geometría bote de orina (izquierda). Vaso cilíndrico equivalente (derecha)

Por lo tanto la caracterización se ha llevado a cabo suponiendo un recipiente cilíndrico de polipropileno, con las dimensiones de la figura 3.6, dentro del cual se encuentra una muestra de agua destilada de 25 mm de altura. En cuanto a las energías para las cuales se desea conocer la eficiencia del detector, se ha optado por una distribución dentro del rango de interés de 45 a 1800 keV (ver fig. 2.4), separadas convenientemente para evitar, en la medida de lo posible, fenómenos de solapamiento de fotopicos que puedan llevar a resultados erróneos.

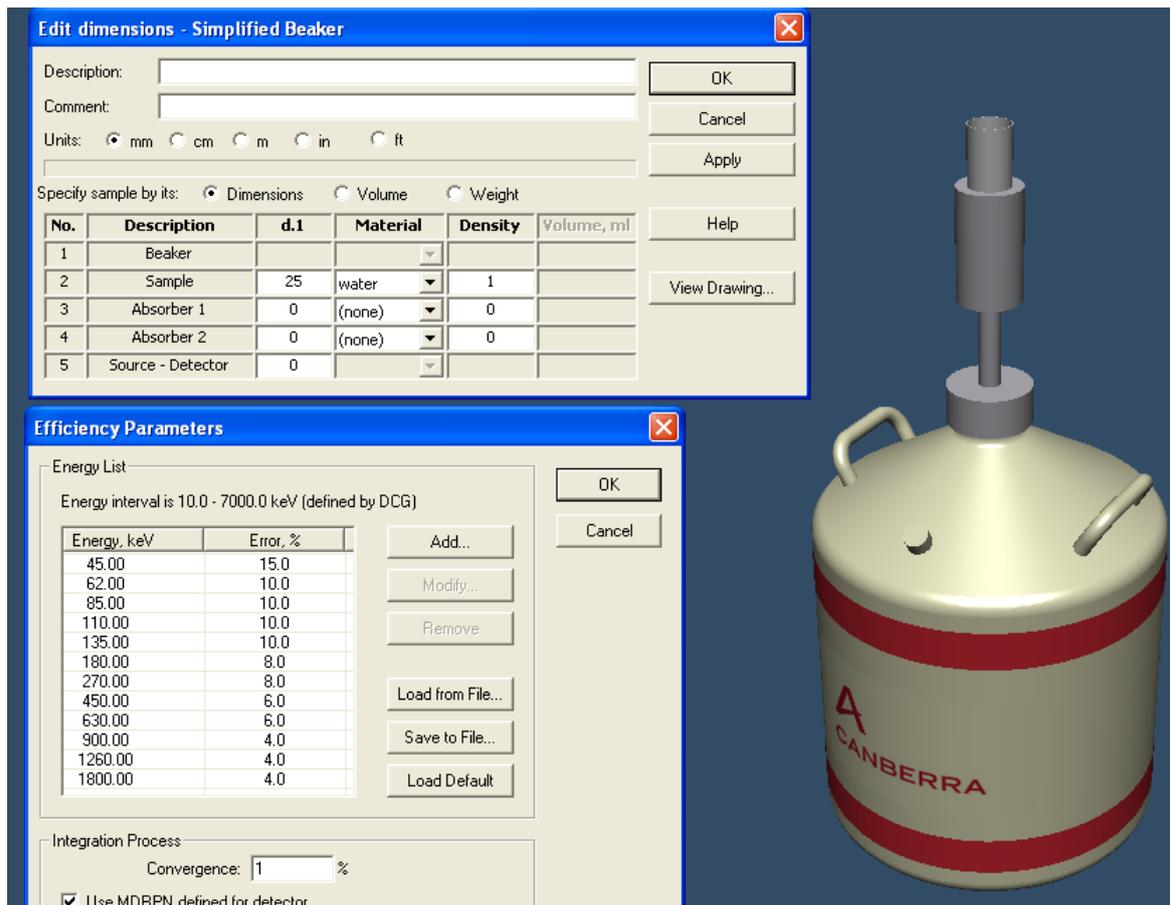


Figura 3.7 Distintos parámetros de simulación LabSOCS

De la simulación en LabSOCS, a partir de las consideraciones explicadas anteriormente se obtienen los resultados de la tabla 3.1. Estos valores de eficiencia son tomados como referencia durante la caracterización computacional.

Energía (keV)	Eficiencia	Incertidumbre (%)
45	1.28597e-001	15
62	1.34341e-001	10
85	1.33018e-001	10
110	1.25742e-001	10
135	1.15334e-001	10
180	9.66806e-002	8
270	6.79590e-002	8
450	4.23012e-002	6
630	3.15051e-002	6
900	2.34173e-002	4
1260	1.79774e-002	4
1800	1.29410e-002	4

Tabla 3.1 Eficiencias de referencia.

3.3.2 Modelización del detector para la simulación mediante PENELOPE

Dada la dificultad a la hora de definir la geometría en el PENELOPE, el desconocimiento de la morfología de determinadas piezas del detector y buscando reducir los tiempos de cálculo, se ha decidido realizar las simulaciones a partir de un modelo simplificado del detector XtRa de Canberra. En dicho modelo, el cual se puede observar en la figura 3.8 con sus características geométricas, no se incluye soporte de sujeción del cristal (prácticamente no influye en las simulaciones realizadas pues las muestras se sitúan en la parte superior del detector). Tampoco se tienen en cuenta las capas muertas superior y del core interno por ser de espesores despreciables (decimas de micrómetros). Además se ha simplificado el detalle de la fijación de la ventana de compuesto de carbono.

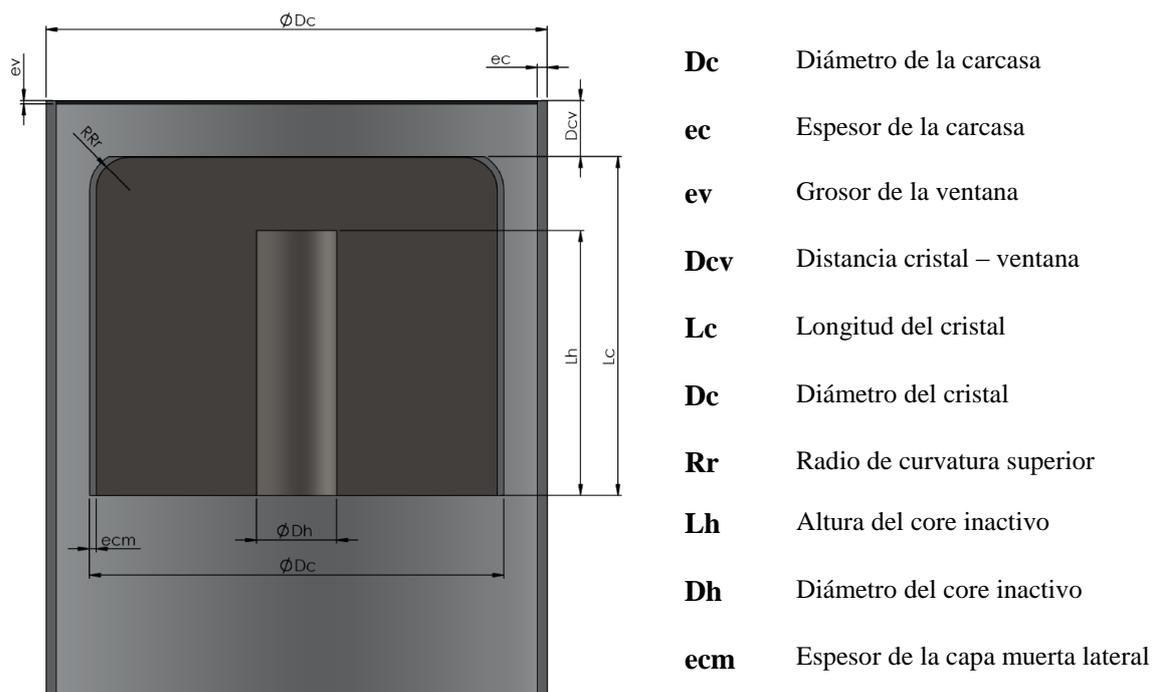


Figura 3.8 Modelo de detector xtra considerado para la simulación mediante PENELOPE

De las características geométricas mostradas en la figura 3.8, las siguientes han sido especificadas por el fabricante, y por lo tanto, consideradas constantes durante la caracterización del detector:

Dc: 73 mm
ec: 1.5 mm
ev: 0.5 mm
Lc: 50.51 mm
Dc: 29.76 mm

El resto de características geométricas del detector (D_{cv} , R_r , L_h , D_h , ec_m) son las variables del problema de optimización.

La figura 3.9 muestra una representación realizada mediante el programa 2D geometry viewer (incluido en el paquete PENELOPE) de un ejemplo de este modelo simplificado del detector, conformado a partir de cuerpos mediante el método explicado en el apartado 3.2.2.3. A la derecha de la figura se puede observar la aproximación discreta, que se ha realizado mediante este método, del redondeo superior. Este redondeo tiene una gran influencia en la respuesta del detector ante radiaciones de baja energía, por lo que la aproximación se ha realizado mediante 32 capas, cuyos espesores son variables en función del radio de redondeo (en el caso de escoger un número superior, el espesor de cada capa podría ser inferior al mínimo exigido por el PENELOPE). Las coordenadas R_{int} y R_{ext} de los cuerpos empleados para conformar el redondeo, han sido obtenidas a partir de la ecuación de la circunferencia.

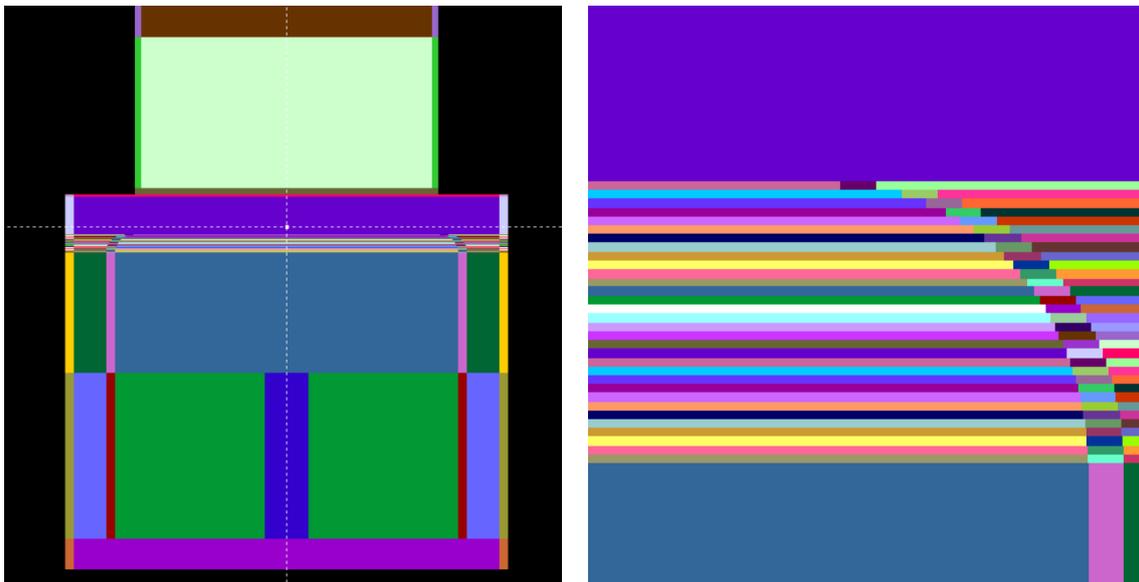


Figura 3.9 Representación cuerpos mediante geometry viewer (izquierda).
 Zoom redondeo superior (derecha).

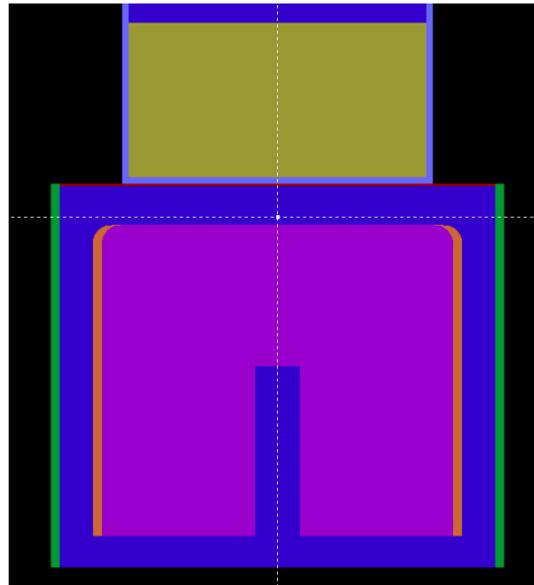


Figura 3.10 Representación materiales mediante geometry viewer.

En la figura 3.10 se muestran los materiales considerados en el modelo, siguiendo el código de colores siguiente:

Material 1	Cristal de HPGe (Germanio hiperpuro).
Material 2	Capa muerta de Ge(Li) (Germanio dopado con litio).
Material 3	Nitrógeno.
Material 4	Carcasa externa aleación de aluminio.
Material 5	Ventana de Compuesto de Carbono.
Material 6	Recipiente de Polipropileno.
Material 7	Muestra de agua destilada.

3.3.3 Implementación conjunta del algoritmo de evolución diferencial y código PENELOPE

En este apartado se explica el procedimiento seguido para la caracterización computacional del detector, para el cual se ha implementado de forma conjunta el algoritmo de evolución diferencial en Matlab, y el código de simulación Montecarlo PENELOPE.

En el algoritmo de evolución diferencial las variables del problema a optimizar están codificadas como un vector de números reales. La longitud de estos vectores (n) es igual al número de variables del problema, y la población está compuesta de NP (Número de padres) vectores. Se define un vector x_p^g , en donde p es el índice del individuo en la población ($p = 1...NP$) y g es la generación correspondiente. Cada vector está a su vez compuesto de las variables del problema, en donde m es el índice de la variable en el individuo ($m = 1...n$).

Se asume que el dominio de las variables del problema está restringido entre unos valores mínimos y máximos x_m^{min} y x_m^{max} . En la tabla 3.2 se muestran los valores mínimos y máximos que restringen el dominio de las 5 características geométricas ($n=5$) desconocidas del detector.

Variable	Descripción	x_m^{min}	x_m^{max}
x_1	Radio de curvatura superior (Rr)	2 mm	6 mm
x_2	Distancia cristal-ventana (Dcv)	3 mm	8mm
x_3	Espesor de capa muerta lateral (ecm)	0.5 mm	1.5 mm
x_4	Diámetro del core inactivo (Dh)	6 mm	14 mm
x_5	Altura del core inactivo (Lh)	20 mm	44 mm

Tabla 3.2 valores mínimos y máximos de las variables del problema.

En la figura 3.11 se muestra el esquema seguido durante el proceso de caracterización computacional, cuyos pasos son explicados a continuación.

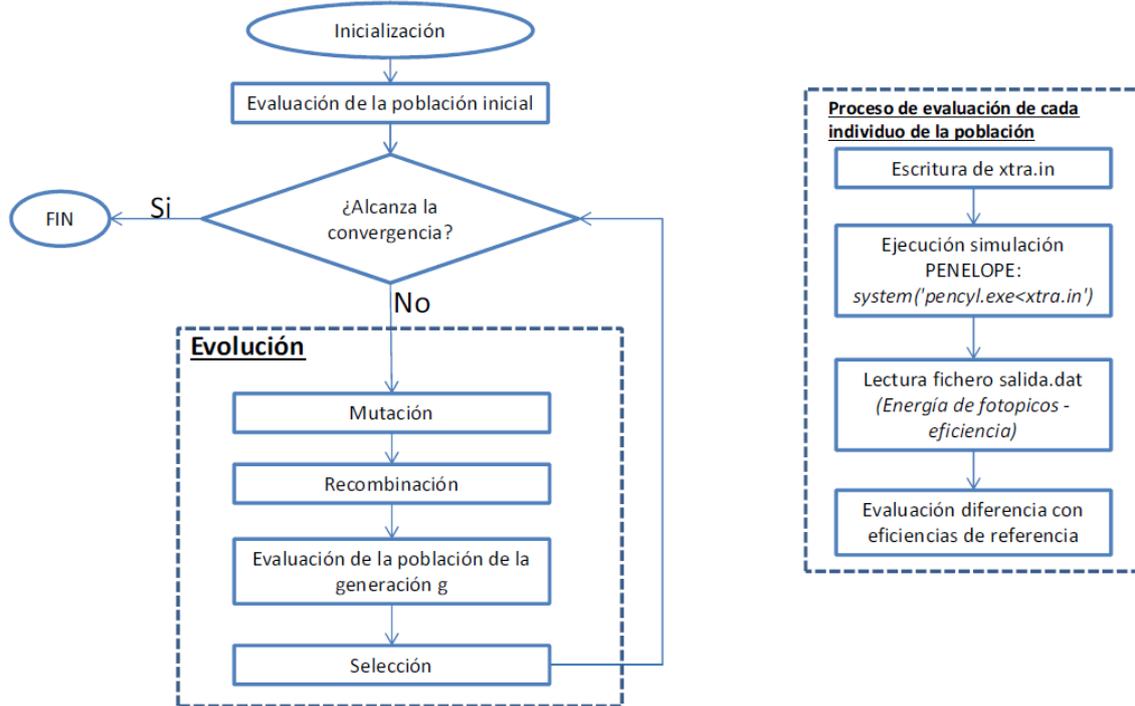


Figura 3.11 Diagrama de flujo del proceso de caracterización computacional mediante el algoritmo de evolución diferencial y el código PENELOPE .

Inicialización

La población es inicializada (primera generación) aleatoriamente, considerando los valores mínimos y máximos de cada variable, según la expresión:

$$\mathbf{x}_{p,m}^1 = \mathbf{x}_m^{\min} + \mathit{rand}(0,1) \cdot (\mathbf{x}_m^{\max} - \mathbf{x}_m^{\min}) \quad [3.2]$$

Mutación

La mutación consiste en la construcción de NP vectores mutantes, los cuales son creados a partir de tres individuos elegidos al azar, llamados vectores objetivo (target vectors), \mathbf{x}_a , \mathbf{x}_b , \mathbf{x}_c . Los vectores mutantes (\mathbf{n}_p^g) son obtenidos de la siguiente manera:

$$\mathbf{n}_p^g = \mathbf{x}_c + F \cdot (\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b) \quad [3.3]$$

Con $a, b, c \in \{1,2,\dots, NP\}$ distintos entre sí.

Para asegurar que las componentes de los vectores mutantes se encuentren dentro del intervalo $[x_m^{min}, x_m^{max}]$ se hace lo siguiente:

$$\begin{aligned} \text{Si } n_{p,m}^g < x_m^{min} \text{ entonces } n_{p,m}^g &= x_m^{min} \\ \text{Si } n_{p,m}^g > x_m^{max} \text{ entonces } n_{p,m}^g &= x_m^{max} \end{aligned} \quad [3.4]$$

F es un parámetro que controla la tasa de mutación, y se encuentra en el rango $[0,2]$. La buena elección de este parámetro, relacionado con la velocidad de convergencia, incrementa la precisión de la solución por la capacidad de escapar de óptimos locales. En general, la habilidad de realizar búsqueda local (explotación) se logra a través de valores de F pequeños y, por el contrario, realizar búsqueda global (exploración) se consigue con mayores valores de F . (J. Zhang and A. Sanderson, 2009). Con el objetivo de explorar el espacio de soluciones en las primeras iteraciones y explotarlo en las últimas, se ha empleado un factor de mutación variable a lo largo de las generaciones según la expresión:

$$F = 2 \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + e^{5 - 0.15 \cdot g}} \right) \quad [3.5]$$

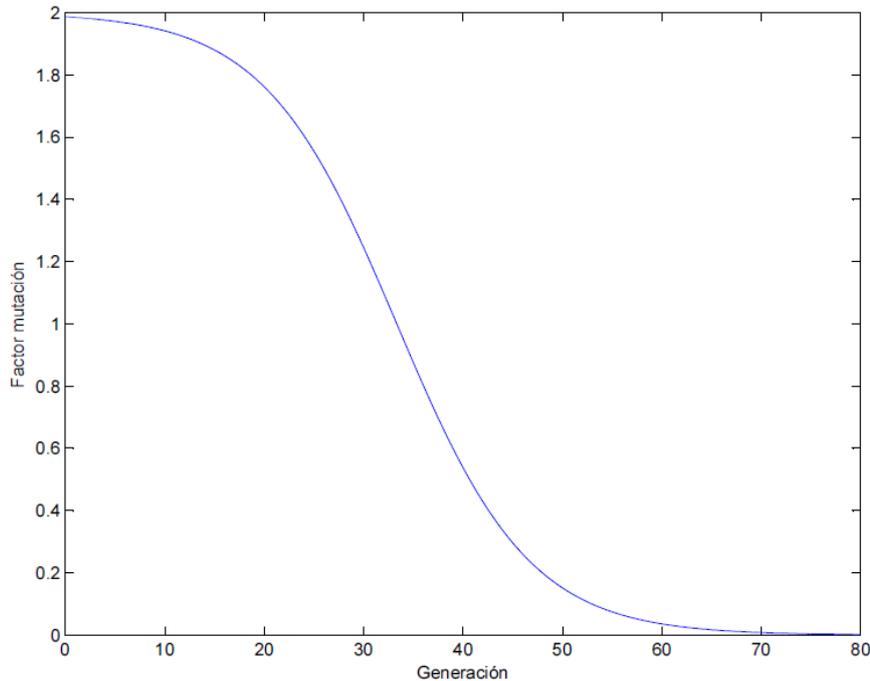


Figura 3.12 Variación del factor de mutación F en función de la generación g .

Recombinación

Una vez obtenidos los NP vectores mutantes, la recombinación se efectúa de manera aleatoria, comparándolos con los vectores originales (x_p^g), obteniendo los vectores de prueba (trial vectors, t_p^g) de la siguiente manera:

$$t_{p,m}^g = \begin{cases} n_{p,m}^g & \text{si } rand(0, 1) < GR \\ x_{p,m}^g & \text{en otro caso} \end{cases} \quad [3.6]$$

GR es un parámetro que controla la tasa de recombinación. Nótese que la comparación se hace variable por variable, por lo que el vector de prueba será una mezcla entre los vectores mutantes y originales.

Selección

Finalmente, la selección se realiza simplemente comparando los vectores de prueba con los originales, de manera que el vector de la generación siguiente será aquel que tenga el mejor (menor en el presente problema de minimización) valor de la función a optimizar (f_{opt}):

$$x_p^{g+1} = \begin{cases} t_p^g & \text{si } f_{opt}(t_p^g) < f_{opt}(x_p^g) \\ x_p^g & \text{en otro caso} \end{cases} \quad [3.7]$$

En este trabajo, el óptimo es el mínimo global de la función objetivo que consiste en la evaluación de las diferencias entre las eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE, y las eficiencias de referencia, según la expresión:

$$f_{opt}(x_p^g) = \sum_{i=1}^{i=e} \left(\varepsilon_{PEN}(x_{p,1}^g, x_{p,2}^g, x_{p,3}^g, x_{p,4}^g, x_{p,5}^g, E_i) - \varepsilon_{ref}(E_i) \right)^2 \quad [3.8]$$

Donde:

- e es el número de fotopicos para los cuales se quiere calcular la eficiencia.
- E_i es la energía correspondiente a cada fotopico.

- $\varepsilon_{PEN}(x_{p,1}^g, x_{p,2}^g, x_{p,3}^g, x_{p,4}^g, x_{p,5}^g, E_i)$ es la eficiencia calculada mediante el PENELOPE, correspondiente a los valores de las variables $x_{p,m}^g$ y para un fotopico de energía E_i .
- $\varepsilon_{ref}(E_i)$ es la eficiencia de referencia (calculados en este trabajo mediante el programa LabSOCS) para un fotopico de energía E_i .

3.3.4 Ejecución y resultado de la caracterización

El algoritmo evolutivo se ha ejecutado, con un tamaño de población de 48 individuos ($NP = 48$), considerando un factor de mutación F que decrece desde 2 hasta 0, según la expresión [3.5] del apartado anterior y para una tasa de recombinación GR de 0.9. El criterio de parada seguido ha sido un número máximo de 100 generaciones. La mejor solución obtenida se muestra en la tabla 3.3.

Variable	Descripción	Valor
x_1	Radio de curvatura superior (Rr)	3.46 mm
x_2	Distancia cristal-ventana (Dcv)	7.19 mm
x_3	Espesor de capa muerta lateral (ecm)	0.50 mm
x_4	Diámetro del core inactivo (Dh)	6.26 mm
x_5	Altura del core inactivo (Lh)	37.40 mm

Tabla 3.3 Solución óptima.

El valor de la función a optimizar para esta solución es:

$$f_{opt}(x_{popt}^g) = 7.7454 \cdot 10^{-7} .$$

La tabla 3.4 muestra una comparación entre las eficiencias de fotopico calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.128148	0.128597	0.3
62	0.134547	0.134341	0.2
85	0.133047	0.133018	0.0
110	0.125400	0.125742	0.3
135	0.115188	0.115334	0.1
180	0.096152	0.096681	0.5
270	0.067938	0.067959	0.0
450	0.042175	0.042301	0.3
630	0.031737	0.031505	0.7
900	0.023304	0.023417	0.5
1260	0.017839	0.017977	0.8
1800	0.013037	0.012941	0.7

Tabla 3.4 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS.

Donde la diferencia relativa porcentual ha sido calculada mediante la siguiente expresión:

$$Diferencia\ relativa\ (\%) = \frac{|Eficiencia\ PENELOPE - Eficiencia\ LabSOCS|}{Eficiencia\ LabSOCS} \cdot 100 \quad [3.9]$$

La calibración en eficiencia del detector se ha realizado a partir de los datos de energía - eficiencia de fotopicos, por medio de un ajuste por mínimos cuadrados a un polinomio de cuarto grado:

$$\ln(\epsilon) = p_0 + p_1 \cdot \ln(E) + p_2 \cdot (\ln(E))^2 + p_3 \cdot (\ln(E))^3 + p_4 \cdot (\ln(E))^4 \quad [3.10]$$

Los coeficientes calculados mediante el ajuste se muestran a continuación:

$$\begin{aligned} p_0 &= -359.62 \\ p_1 &= 102.00 \\ p_2 &= -10.69 \\ p_3 &= 0.49 \\ p_4 &= -0.01 \end{aligned}$$

En la figura 3.13 se muestra gráficamente la regresión no lineal realizada, en la que se puede observar que el ajuste de la curva a la nube de puntos es bastante bueno.

Un indicador de la bondad del ajuste es el coeficiente de determinación, R^2 , cuyo valor es del 0.9995. Su proximidad a la unidad corrobora la afirmación anterior.

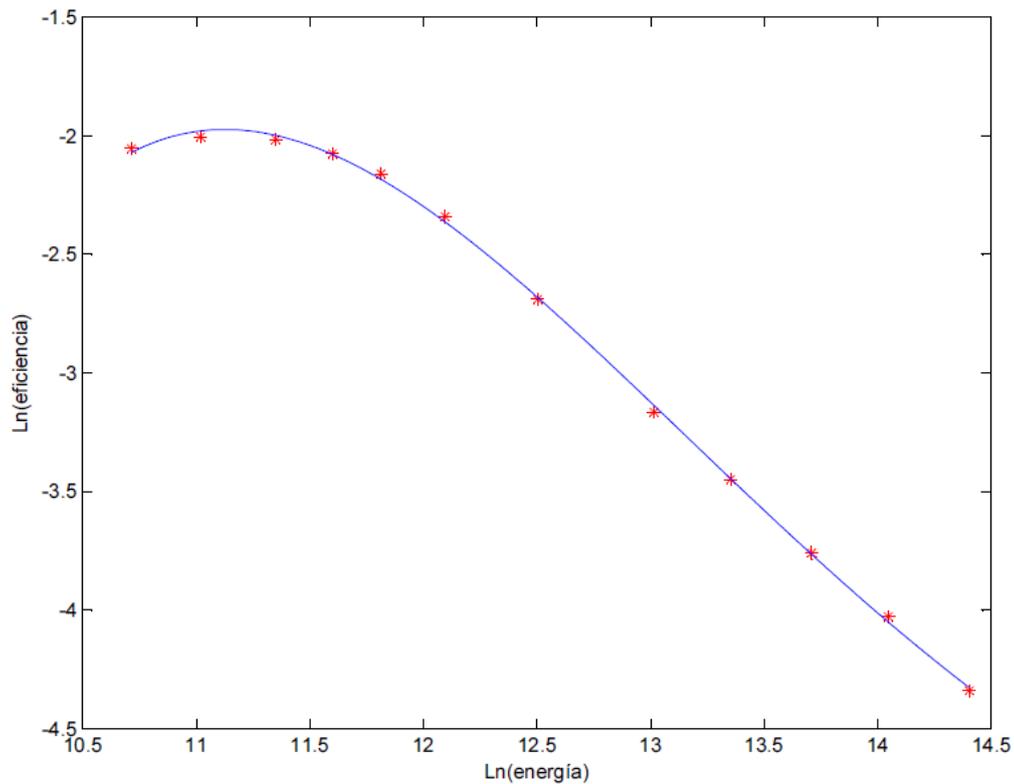


Figura 3.13 Ajuste de la nube de puntos (energía-eficiencia PENELOPE en escala logarítmica) mediante polinomio de cuarto grado.

La curva en escala logarítmica es útil a la hora de realizar el ajuste, pero el objetivo de la calibración en eficiencia es establecer una expresión de la eficiencia en función de la energía. A continuación se muestra la expresión $\varepsilon = f(E)$ obtenida del ajuste, la cual se encuentra representada en la figura 3.14.

$$\varepsilon = e^{-359.62+102.00 \cdot \ln(E)-10.69 \cdot (\ln(E))^2+0.49 \cdot (\ln(E))^3-0.01 \cdot (\ln(E))^4} \quad [3.11]$$

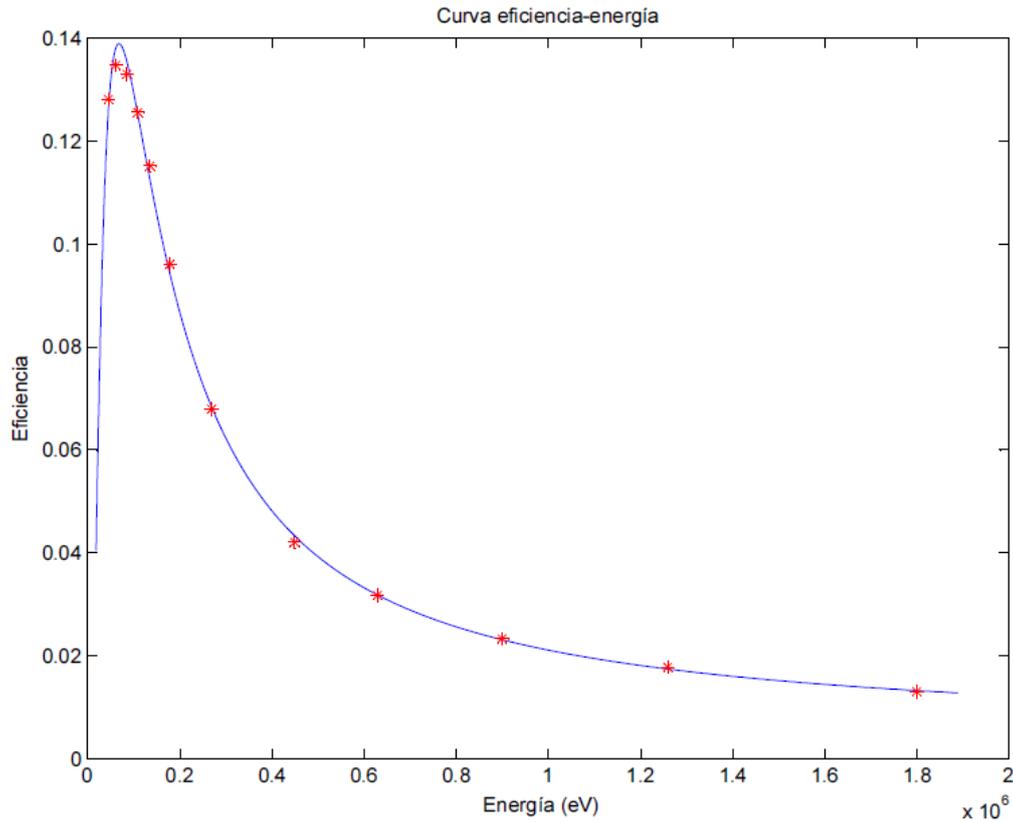


Figura 3.14 Ajuste energía-eficiencia PENELOPE.

A partir de las eficiencias de referencia (obtenidas mediante LabSOCS), por un procedimiento análogo, se ha construido la curva energía-eficiencia, la cual se presenta en la figura 3.15 junto a la anteriormente obtenida a partir de las eficiencias PENELOPE. En dicha figura se puede observar que la diferencia entre ambas curvas de eficiencia es prácticamente inapreciable. En la figura 3.16 se muestra la diferencia relativa entre ambas curvas en función de la energía, calculada a partir de la expresión [3.12], pudiendo observarse que la diferencia relativa no supera en ningún caso, en valor absoluto, el 0.5 %, dándose la máxima divergencia entre ambas curvas para una energía de aproximadamente 400 keV.

$$Diferencia\ relativa(\%) = \frac{\epsilon_{PENELOPE} - \epsilon_{LabSOCS}}{\epsilon_{LabSOCS}} \cdot 100 \quad [3.12]$$

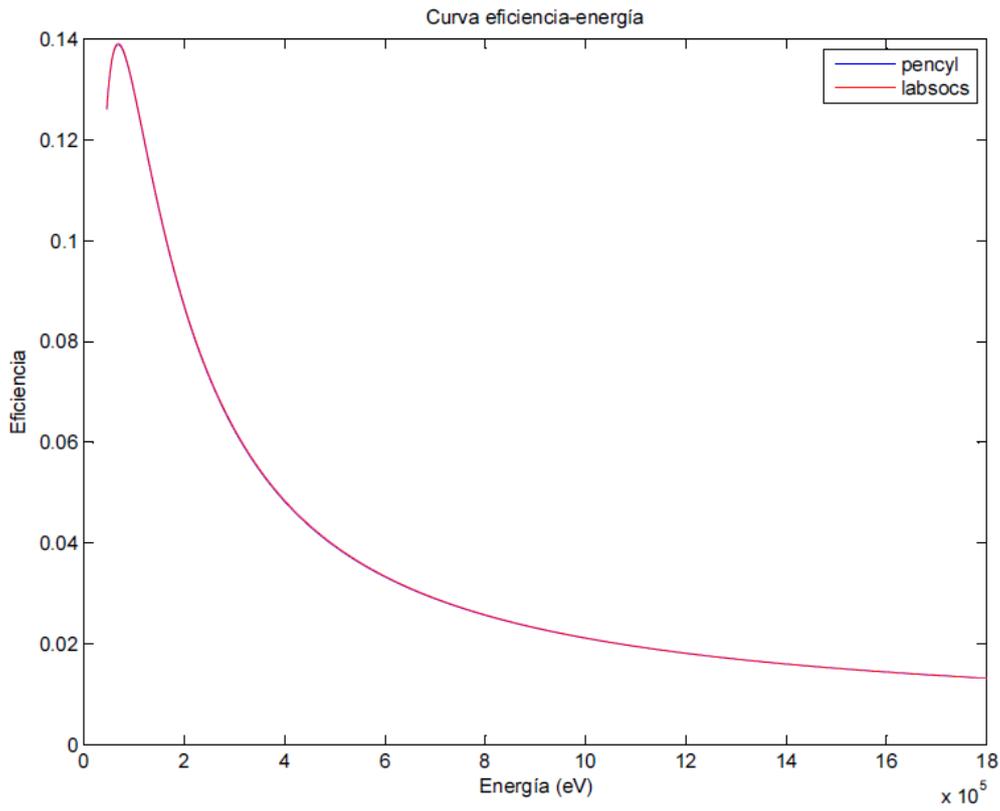


Figura 3.15 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS.

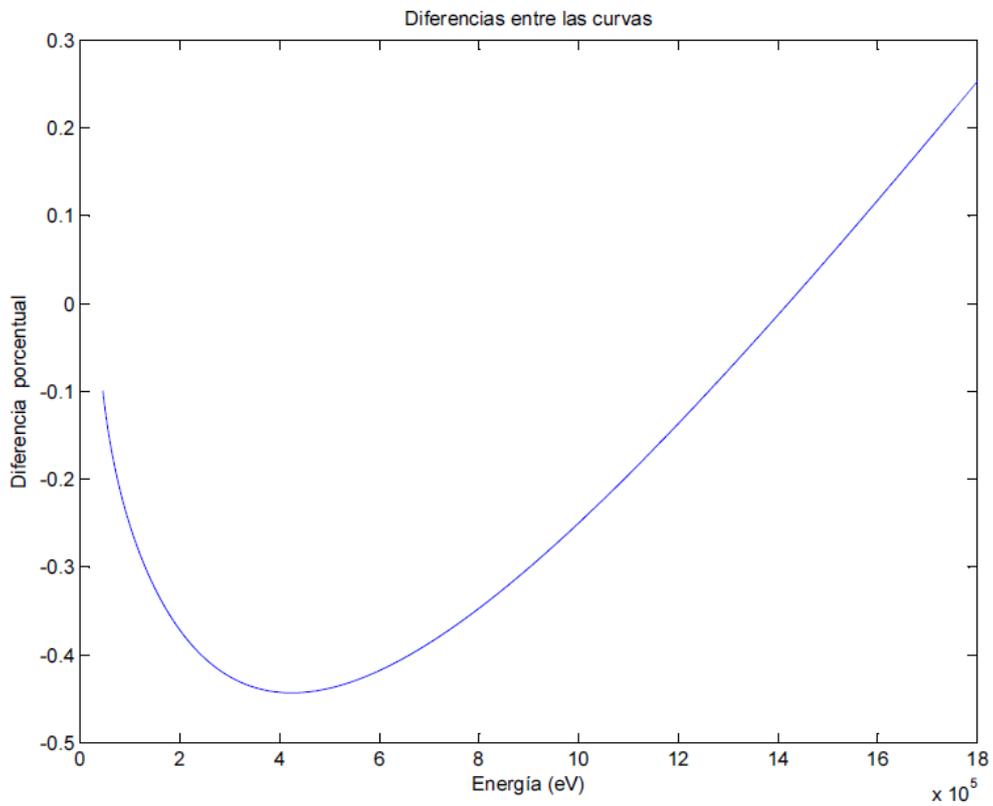


Figura 3.16 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS.

Ampliando el dominio de representación de ambas curvas de eficiencia, al rango (10keV-7Mev), se observa en las figuras 3.17 y 3.18 que la diferencia entre ambas aumenta, pero la aproximación sigue siendo bastante buena.

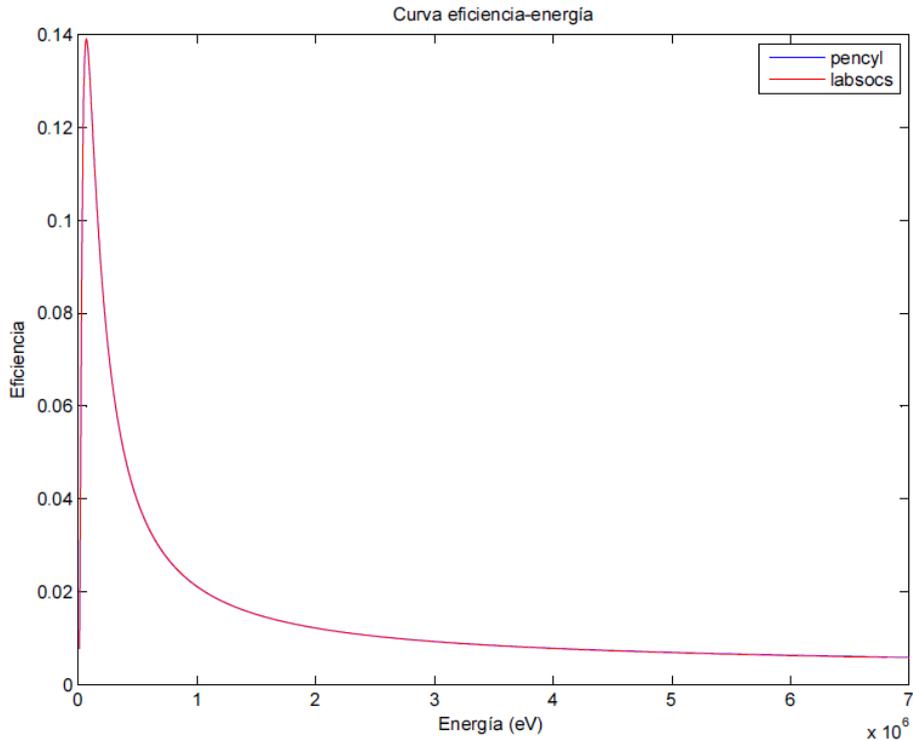


Figura 3.17 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS.

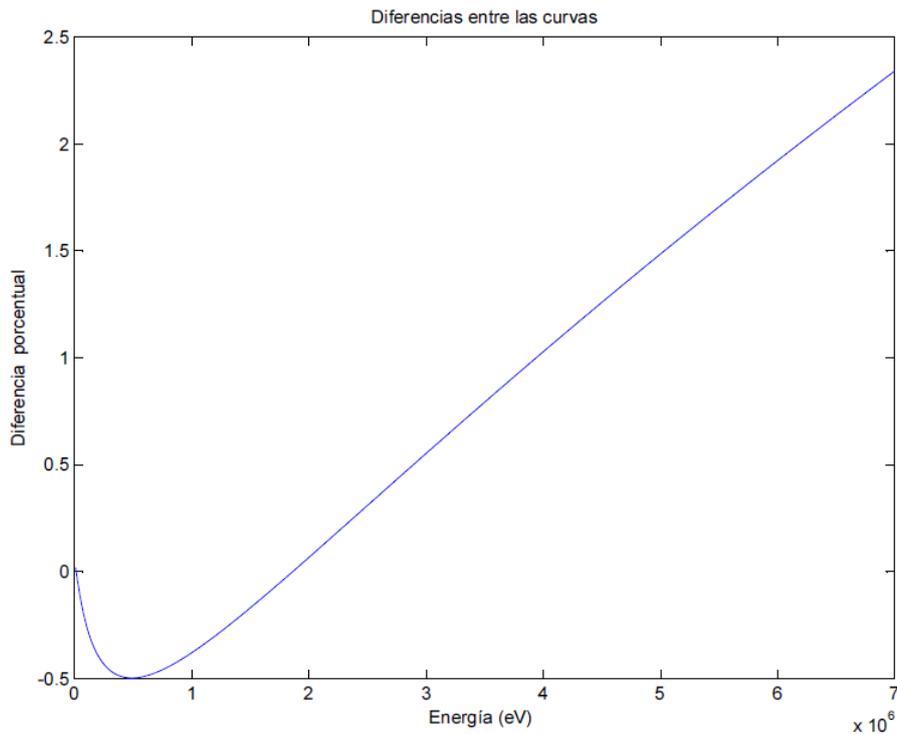


Figura 3.18 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS.

4. VALIDACIÓN DEL PROCEDIMIENTO DE CARACTERIZACIÓN

Dado que la caracterización ha sido realizada considerando un solo tipo de muestra (agua destilada con una única geometría), se hace necesario comprobar la bondad de la caracterización para distintas muestras (con diferentes materiales y geometría).

Para ello, en primer lugar se han realizado una serie de comparaciones entre calibraciones en eficiencia mediante PENELOPE Y LabSOCS, para distintas geometrías de la muestra (apartado 4.1 y 4.2). Además, en el apartado 4.3 se comprueba la caracterización realizando calibraciones mediante PENELOPE y posteriormente mediciones de actividad de muestras certificadas, por medio del programa de análisis espectrométrico GENIE 2000 (a partir de dichas calibraciones).

4.1 Comprobación de la caracterización para distintas alturas de la muestra

En este apartado se han realizado una serie de calibraciones en eficiencia mediante PENELOPE Y LabSOCS, suponiendo el mismo vaso y material de la muestra (agua destilada) empleados para la caracterización, pero con distintas alturas de la muestra (10, 20, 30, 40 y 50 mm).

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.191706	0.195755	2.1
62	0.197082	0.201226	2.1
85	0.192137	0.197443	2.7
110	0.183148	0.185488	1.3
135	0.166348	0.169224	1.7
180	0.137893	0.140730	2.0
270	0.097892	0.097744	0.2
450	0.059903	0.059976	0.1
630	0.043791	0.044256	1.1
900	0.032943	0.032639	0.9
1260	0.024808	0.024884	0.3
1800	0.017782	0.017780	0.0

Tabla 4.1 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para 10 mm de agua destilada.

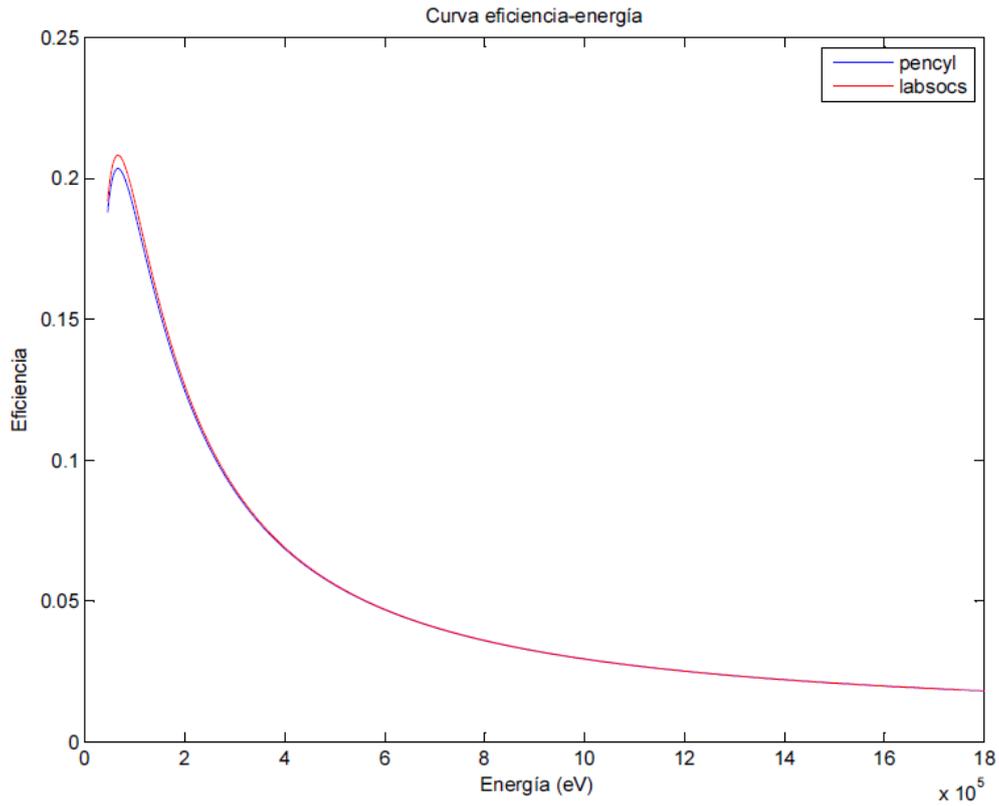


Figura 4.1 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para 10 mm de agua destilada.

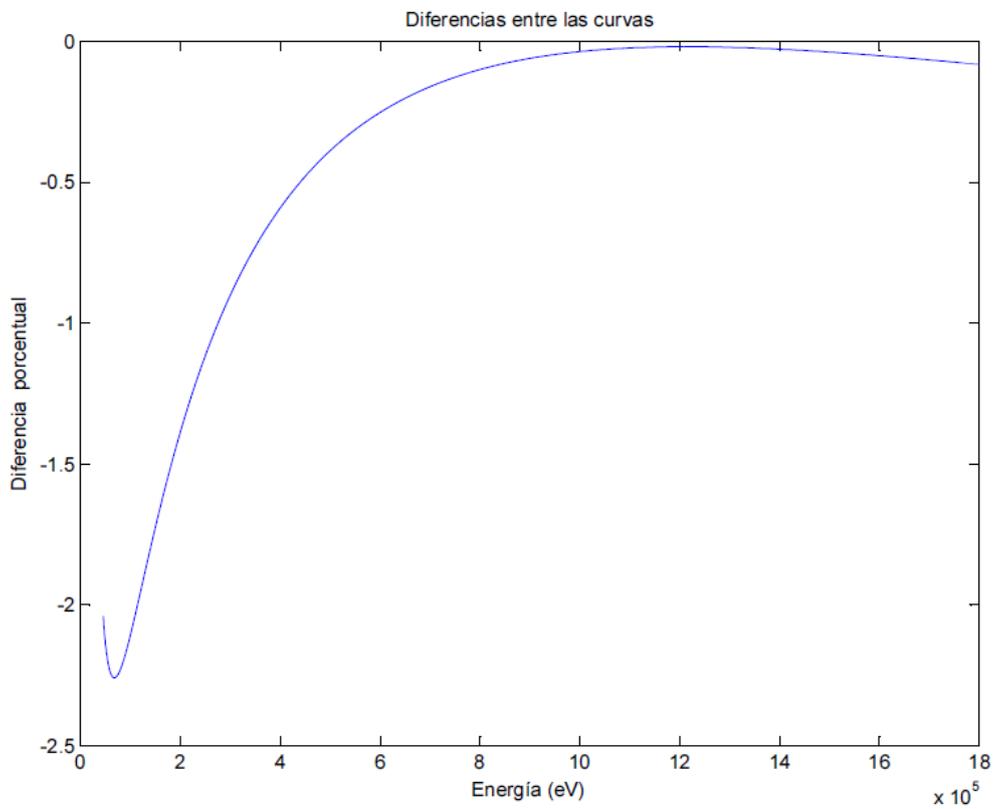


Figura 4.2 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para 10 mm de agua destilada.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.144263	0.145953	1.2
62	0.150420	0.151780	0.9
85	0.147532	0.149888	1.6
110	0.140241	0.141426	0.8
135	0.128528	0.129510	0.8
180	0.106494	0.108301	1.7
270	0.076679	0.075863	1.1
450	0.046801	0.047019	0.5
630	0.035148	0.034924	0.6
900	0.025833	0.025894	0.2
1260	0.019693	0.019832	0.7
1800	0.014791	0.014248	3.8

Tabla 4.2 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para 20 mm de agua destilada.

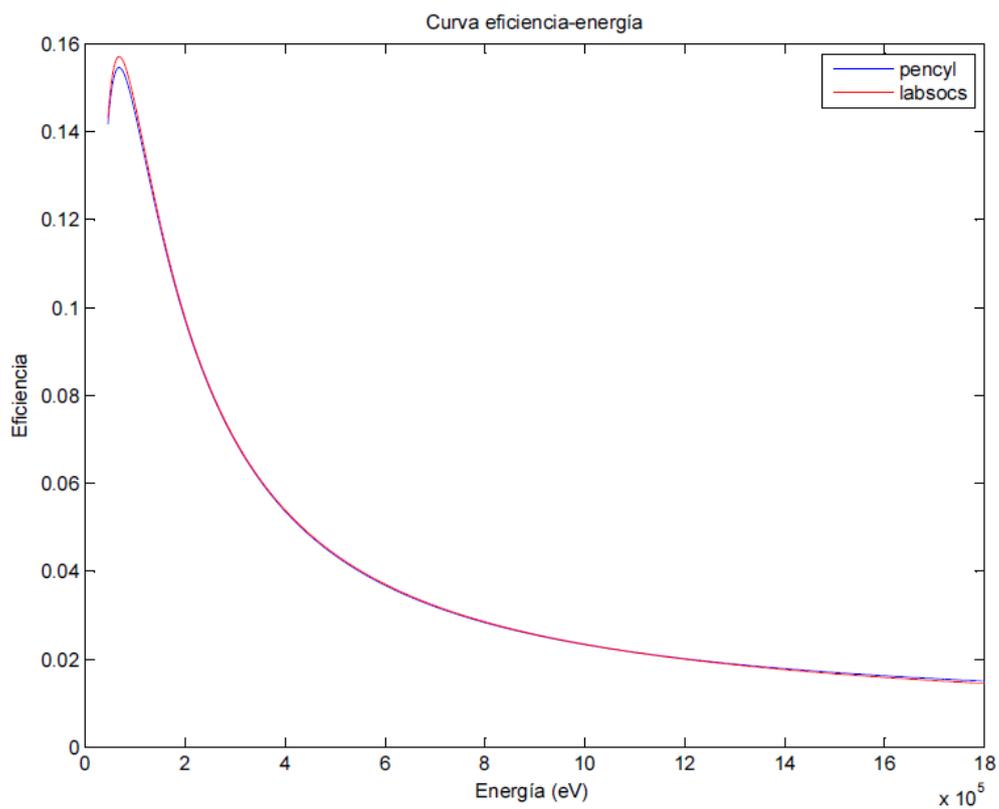


Figura 4.3 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para 20 mm de agua destilada.

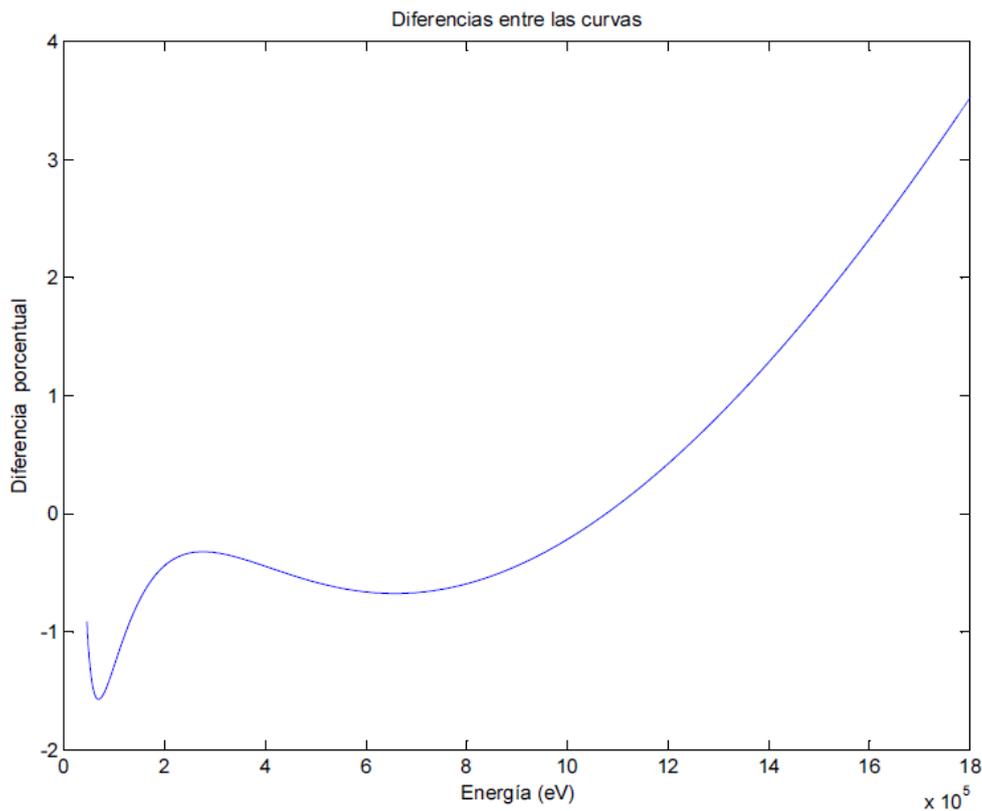


Figura 4.4 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para 20 mm de agua destilada.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.114585	0.114554	0.0
62	0.120977	0.120131	0.7
85	0.117421	0.119224	1.5
110	0.113128	0.112891	0.2
135	0.102979	0.103702	0.7
180	0.086021	0.087121	1.3
270	0.061370	0.061434	0.1
450	0.038850	0.038385	1.2
630	0.029079	0.028653	1.5
900	0.021399	0.021346	0.3
1260	0.016451	0.016420	0.2
1800	0.012055	0.011846	1.8

Tabla 4.3 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para 30 mm de agua destilada.

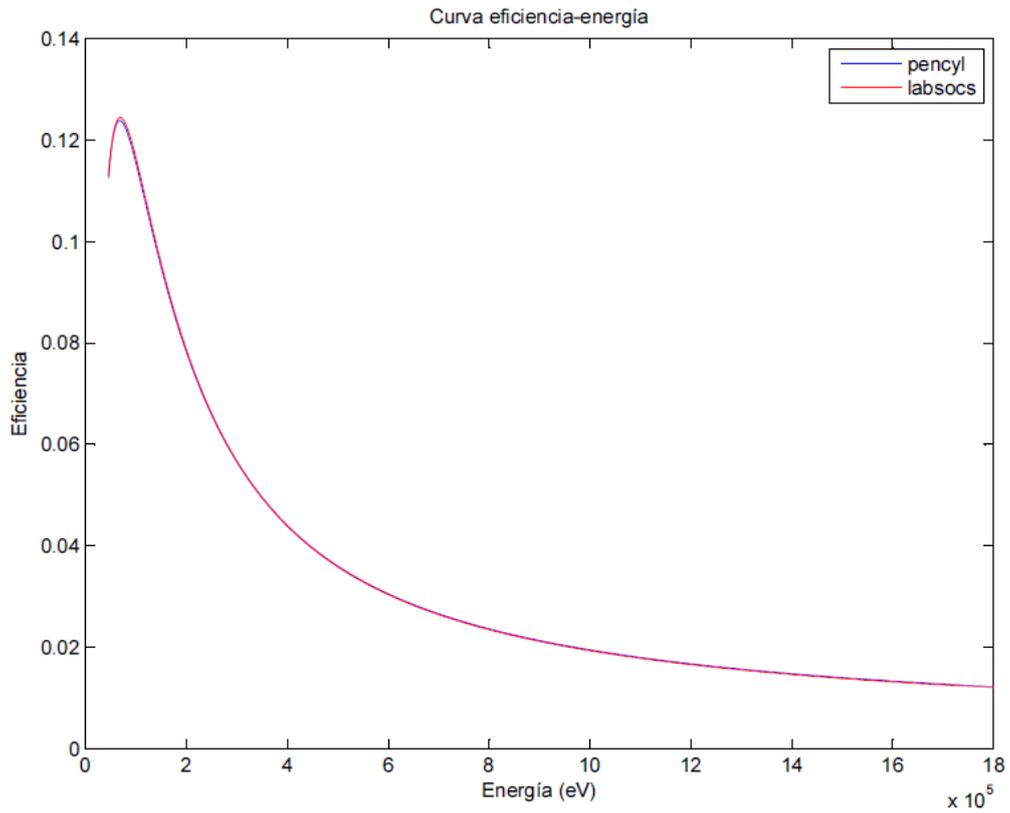


Figura 4.5 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para 30 mm de agua destilada.

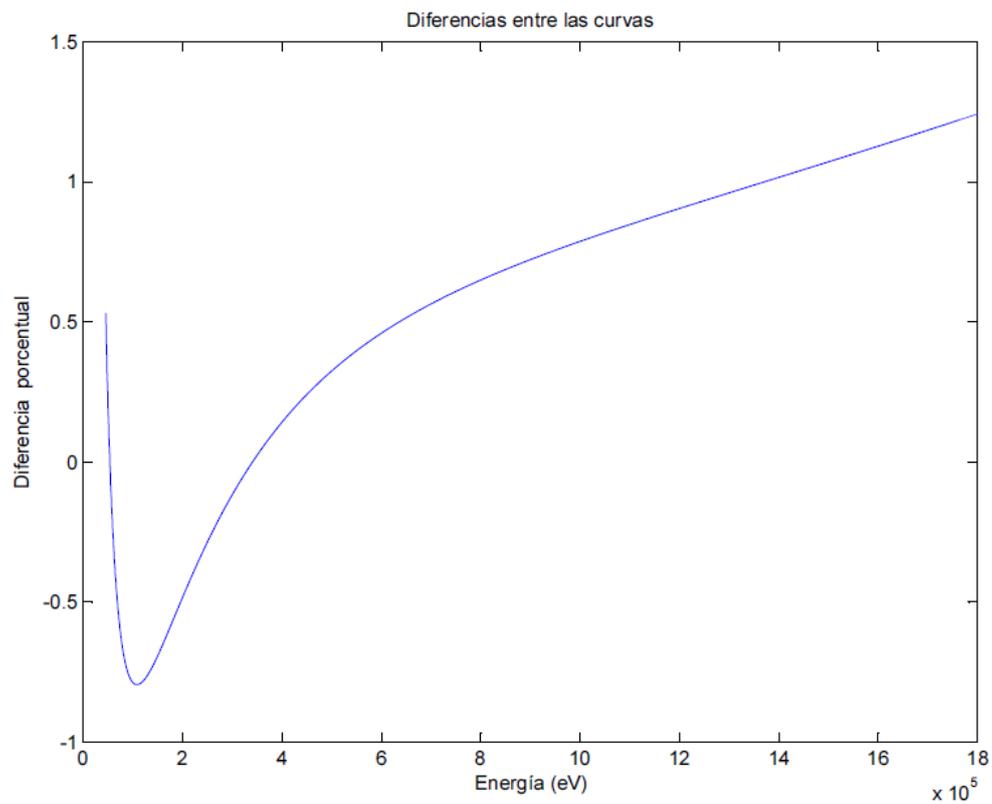


Figura 4.6 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para 30 mm de agua destilada.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.093698	0.093256	0.5
62	0.099827	0.098416	1.4
85	0.097410	0.098052	0.7
110	0.094456	0.093115	1.4
135	0.086091	0.085757	0.4
180	0.071865	0.072325	0.6
270	0.051327	0.051280	0.1
450	0.032674	0.032259	1.3
630	0.024351	0.024172	0.7
900	0.018766	0.018076	3.8
1260	0.013904	0.013951	0.3
1800	0.010284	0.010104	1.8

Tabla 4.4 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para 40 mm de agua destilada.

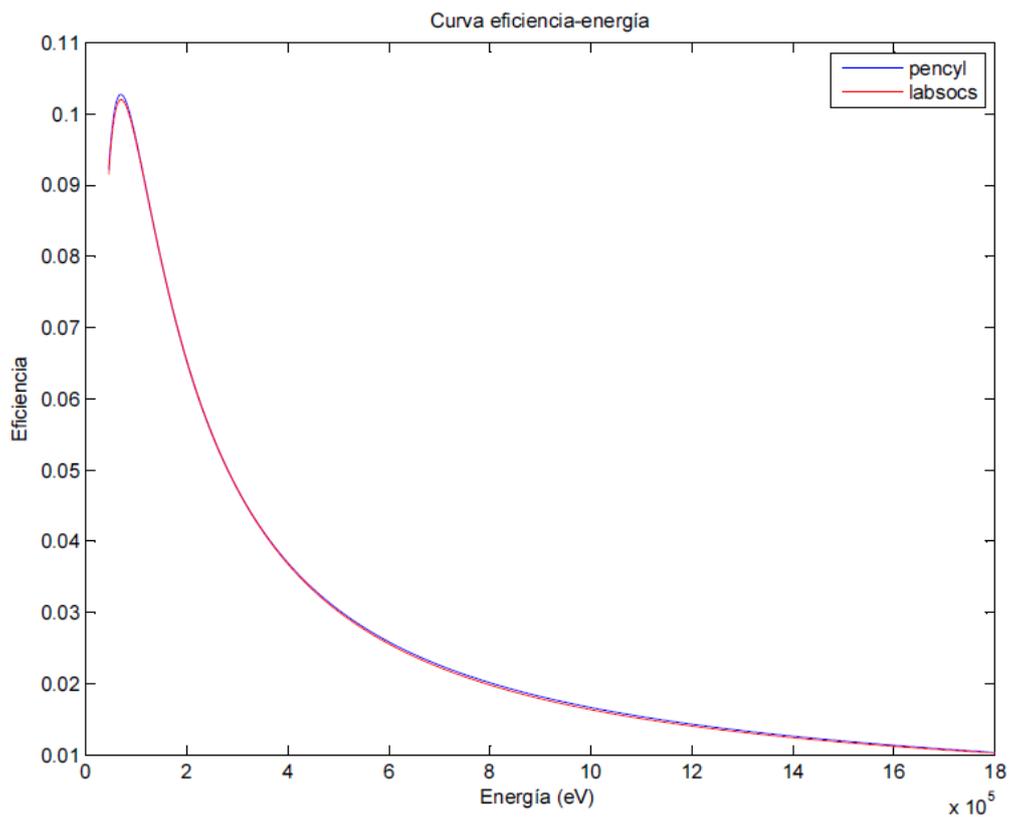


Figura 4.7 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para 40 mm de agua destilada.

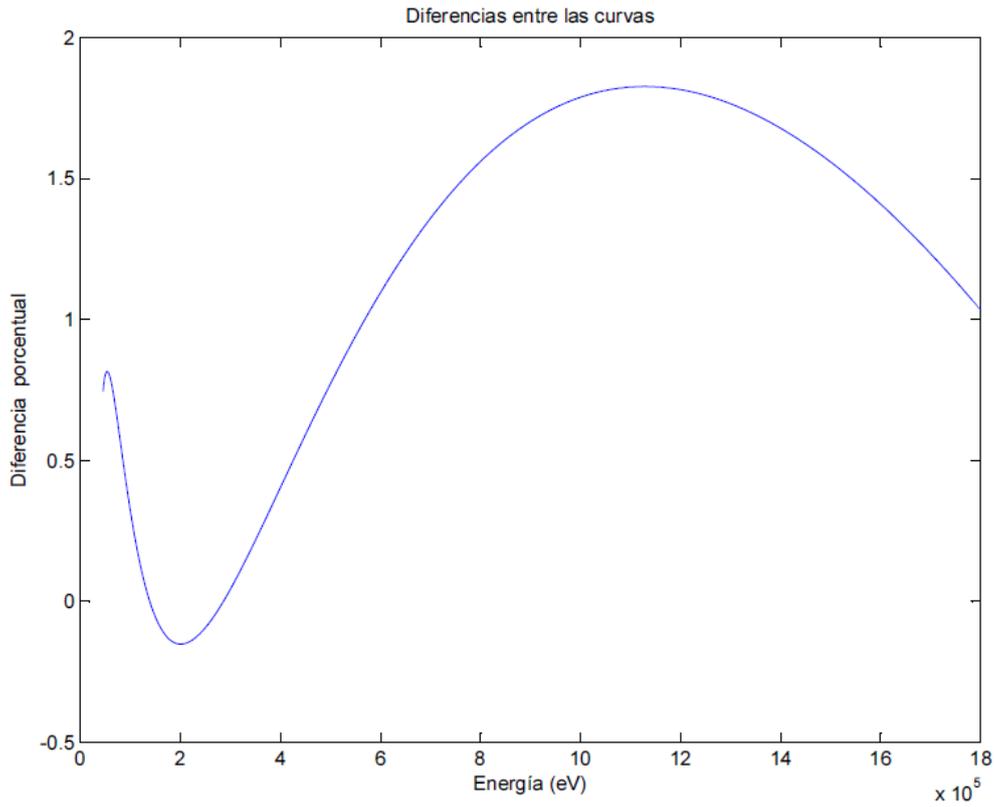


Figura 4.8 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para 40 mm de agua destilada.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.079170	0.078113	1.4
62	0.085832	0.082826	3.6
85	0.082812	0.082764	0.1
110	0.080276	0.078778	1.9
135	0.072322	0.072705	0.5
180	0.060957	0.061509	0.9
270	0.044177	0.043807	0.8
450	0.027935	0.027707	0.8
630	0.020698	0.020832	0.6
900	0.016079	0.015628	2.9
1260	0.012151	0.012098	0.4
1800	0.008785	0.008789	0.0

Tabla 4.5 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para 50 mm de agua destilada.

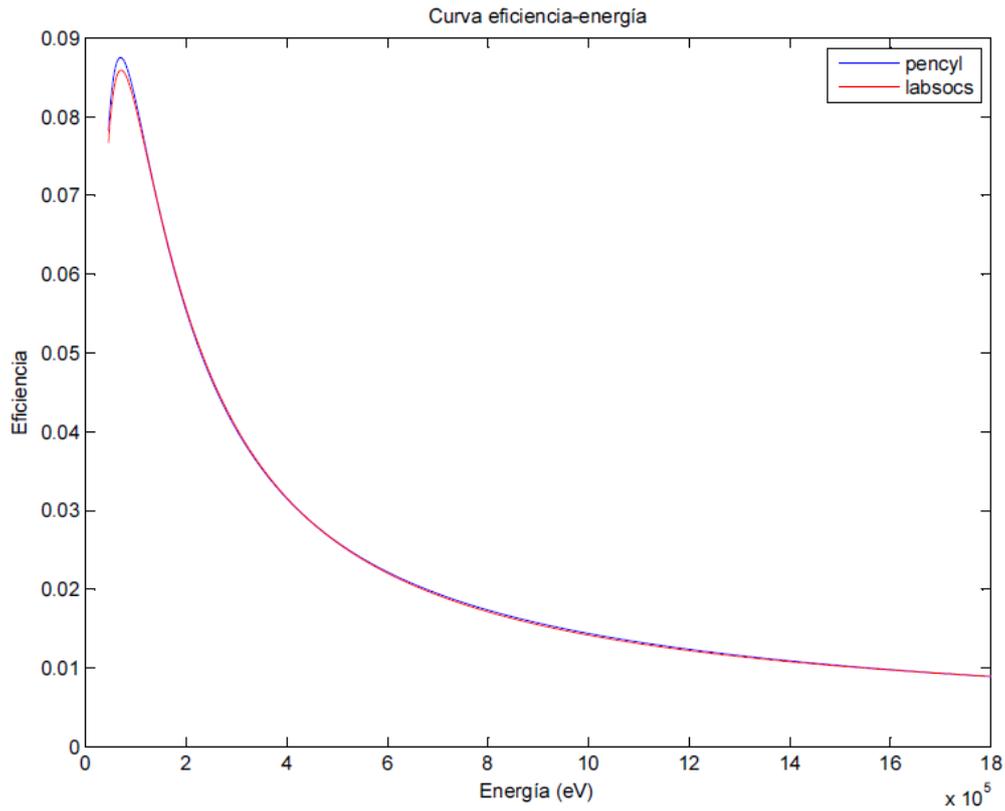


Figura 4.9 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para 50 mm de agua destilada.

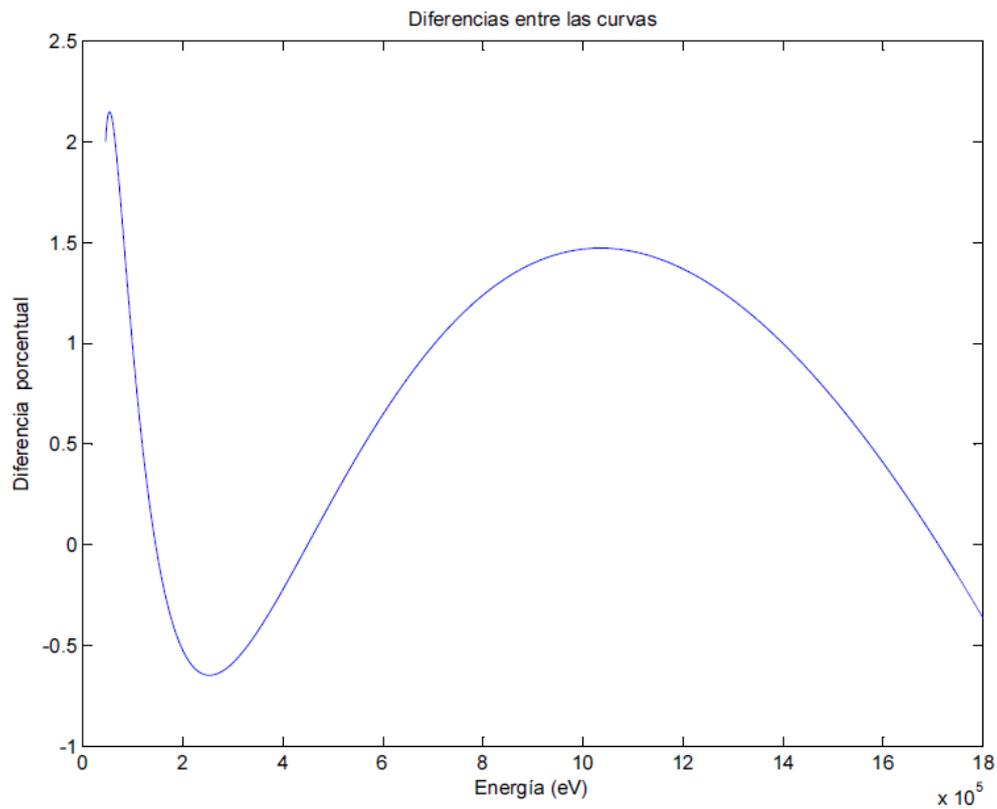


Figura 4.10 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para 50 mm de agua destilada.

4.2 Comprobación de la caracterización para recipientes de distintos diámetros

En este apartado se han realizado una serie de calibraciones en eficiencia mediante PENELOPE Y LabSOCS, considerando el mismo material y altura de la muestra empleados para la caracterización (25 mm de agua destilada), pero con recipientes de diferentes diámetros, los cuales se pueden observar en la figura 4.11.

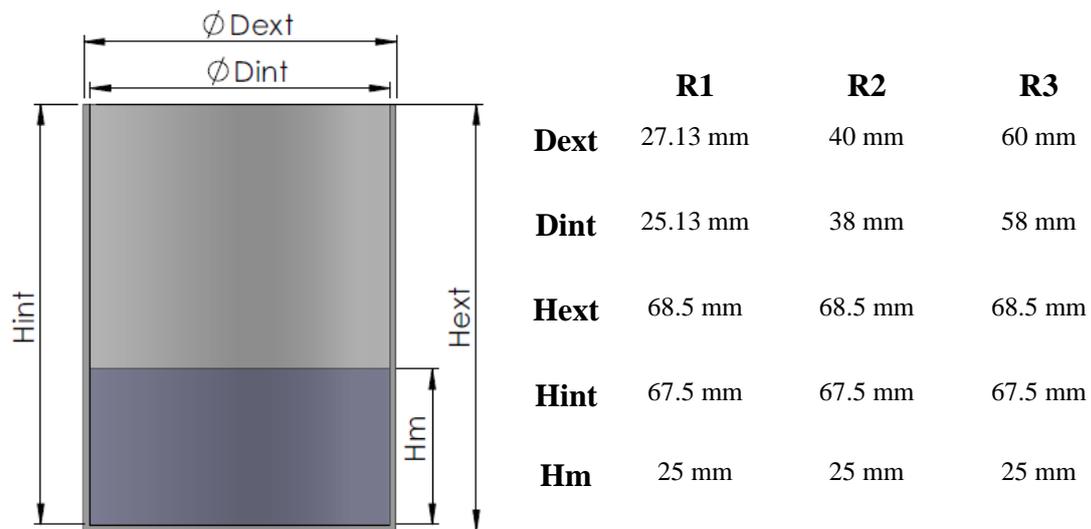


Figura 4.11 Recipientes empleados en la validación de la caracterización.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.150970	0.152352	0.9
62	0.158360	0.157911	0.3
85	0.153363	0.155707	1.5
110	0.145492	0.146702	0.8
135	0.133641	0.133912	0.2
180	0.110517	0.111439	0.8
270	0.078036	0.077615	0.5
450	0.047655	0.047873	0.5
630	0.035527	0.035453	0.2
900	0.025566	0.026194	2.4
1260	0.020107	0.020013	0.5
1800	0.014684	0.014338	2.4

Tabla 4.6 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para recipiente R1.

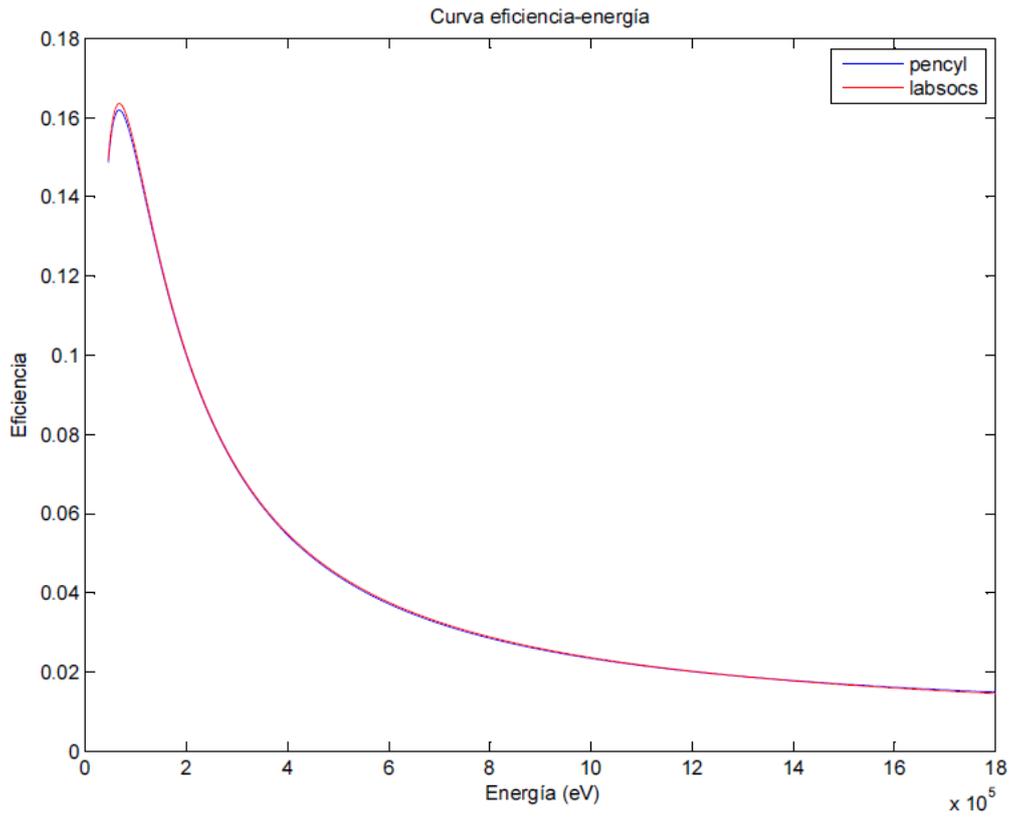


Figura 4.11 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para recipiente R1.

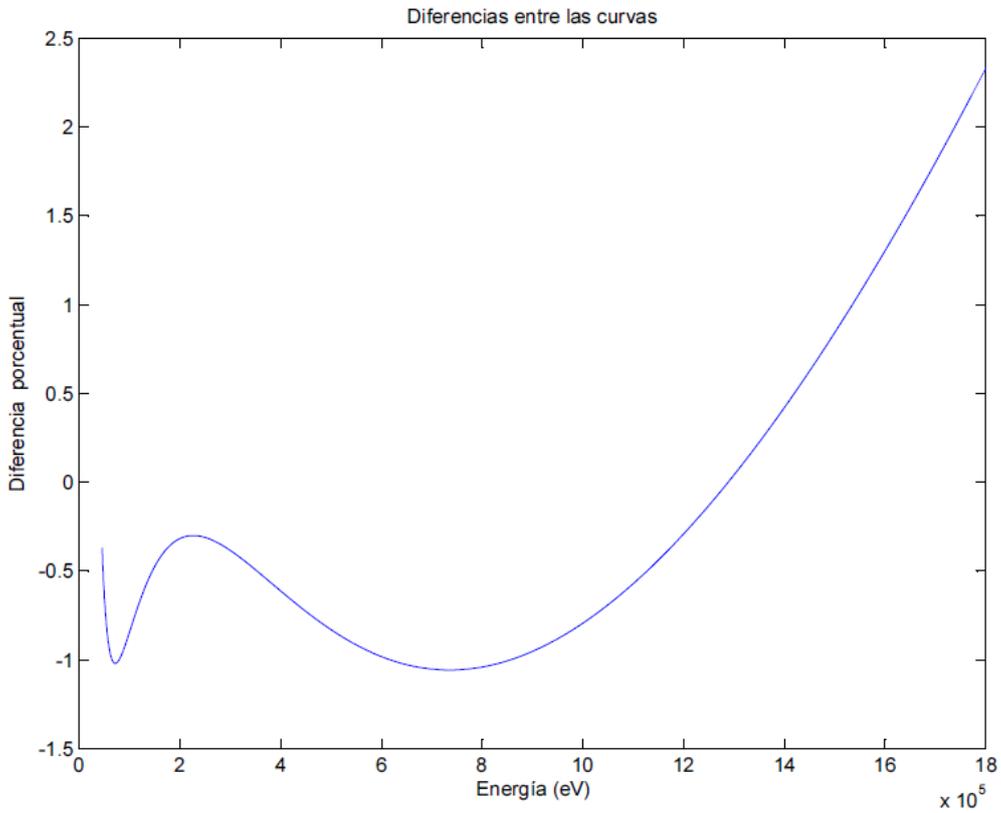


Figura 4.12 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para recipiente R1.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.138421	0.139417	0.7
62	0.145757	0.145210	0.4
85	0.141328	0.143537	1.5
110	0.134740	0.135491	0.6
135	0.122812	0.124005	1.0
180	0.102079	0.103588	1.5
270	0.072606	0.072494	0.2
450	0.044968	0.044908	0.1
630	0.033643	0.033339	0.9
900	0.024639	0.024732	0.4
1260	0.019063	0.018969	0.5
1800	0.013733	0.013602	1.0

Tabla 4.7 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para recipiente R2.

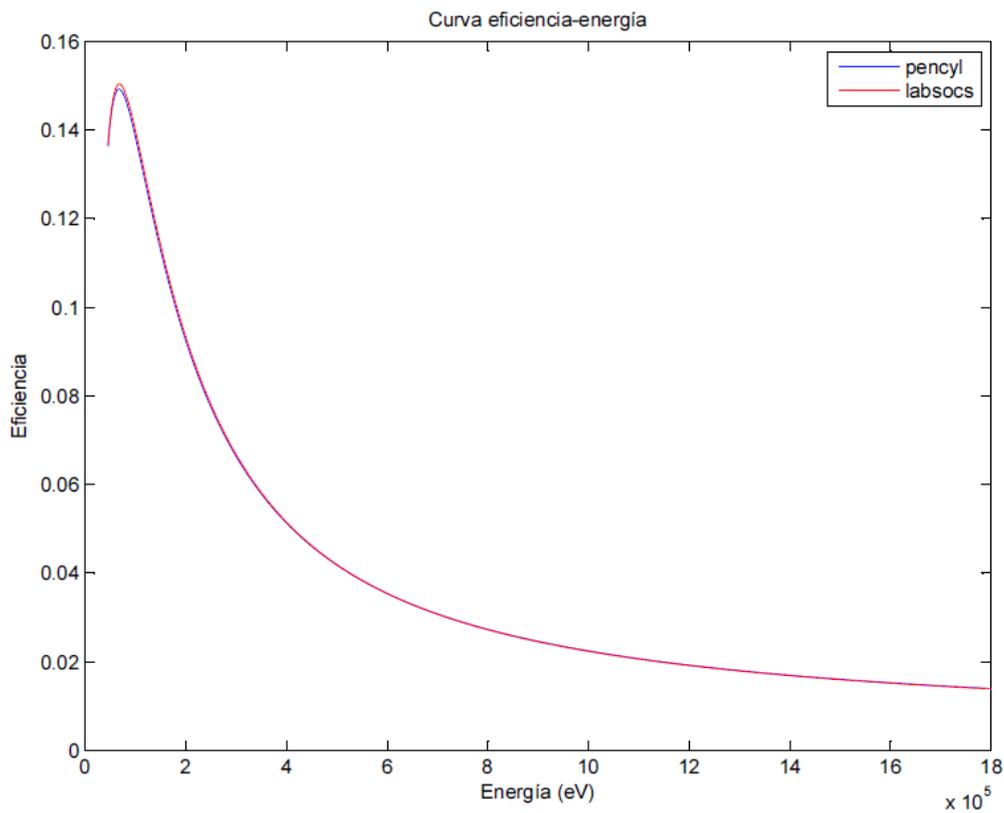


Figura 4.13 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para recipiente R2.

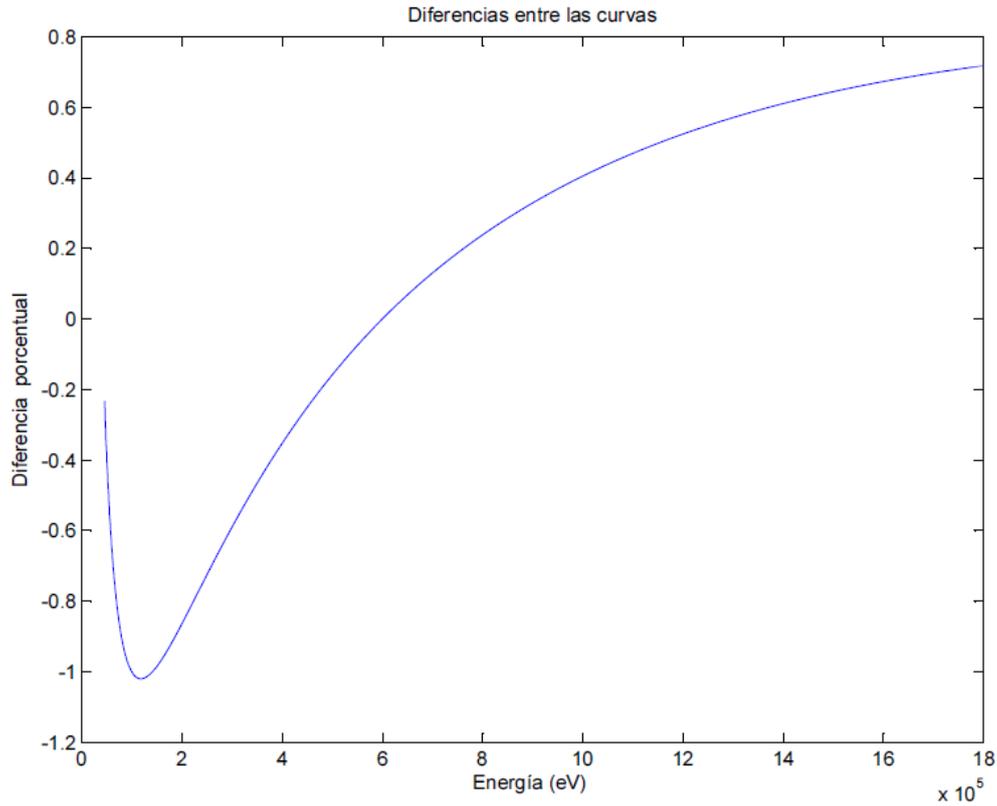


Figura 4.14 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para recipiente R2.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.115411	0.115394	0.0
62	0.122156	0.121015	0.9
85	0.119794	0.120240	0.4
110	0.113995	0.114075	0.1
135	0.104871	0.105043	0.2
180	0.088270	0.088567	0.3
270	0.062251	0.062668	0.7
450	0.039554	0.039250	0.8
630	0.029249	0.029350	0.3
900	0.022177	0.021870	1.4
1260	0.016813	0.016804	0.1
1800	0.012453	0.012158	2.4

Tabla 4.8 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para recipiente R3.

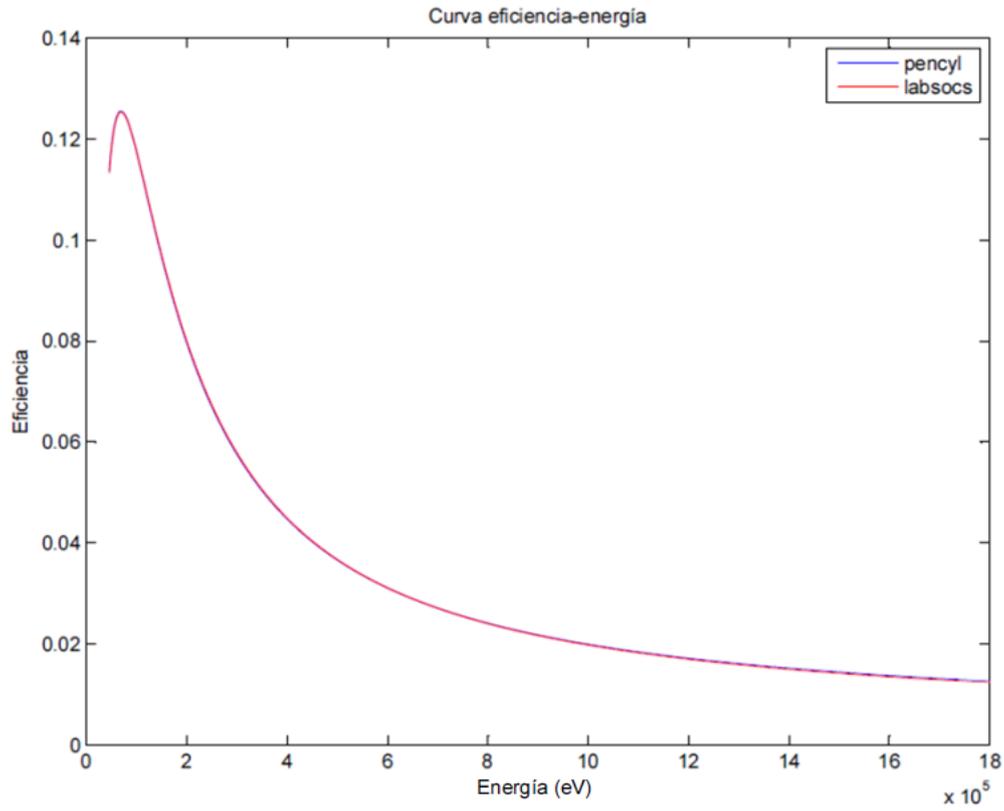


Figura 4.15 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para recipiente R3.

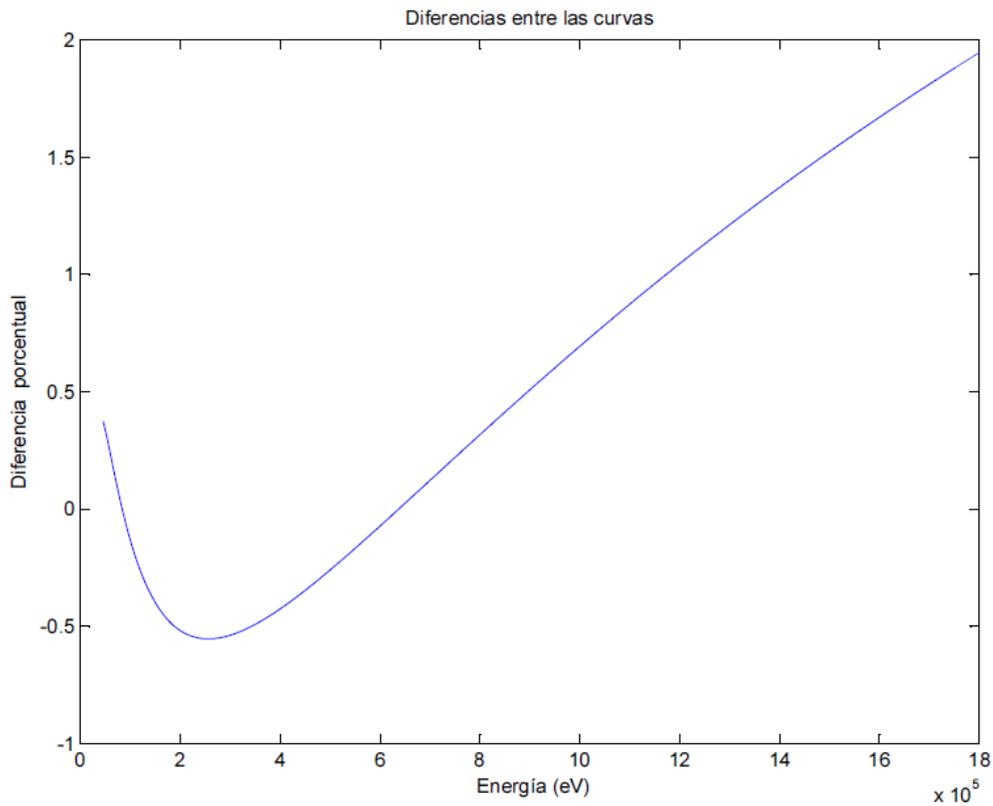


Figura 4.16 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para recipiente R3.

4.3 Comprobación de la caracterización a partir de muestras patrón

En este apartado se pretende validar la caracterización objetivo del presente trabajo, mediante la comparación de los resultados del análisis espectrométrico gamma realizado a una serie de muestras patrón, con sus actividades certificadas. Dicho análisis ha sido realizado mediante el software GENIE 2000, partiendo de la calibración en eficiencia mediante PENELOPE (a partir de la caracterización que se pretende validar). Adicionalmente se ha realizado el análisis espectrométrico a partir de la calibración LabSOCS, con el objetivo de comparar las actividades de las muestras, a partir de ambas calibraciones.

4.3.1 Descripción de las muestras patrón

Se han utilizado tres muestras patrón suministradas por la Agencia Internacional de la Energía Atómica (IAEA), Las características de dichas muestras patrón están resumidas en las tablas 4.9 a 4.11.

Nucleido	Magnitud	Unidad	Incertidumbre 95% C.I.
⁴⁰ K	14000	Bq/kg	13600-14400
K	448000	mg/kg	445000-451000
Th	6744	--	--
U	7390	--	--

Tabla 4.9 IAEA-RGK-1, Potassium Sulfate.

El patrón para el potasio OIEA-RGK-1 se produce a partir de material de alta pureza (99.8%), sulfato de potasio (K₂SO₄) suministrado por la empresa Merck. El contenido de potasio, así como la actividad y sus incertidumbres se obtuvieron mediante un gran número de medidas realizadas en los laboratorios de la Agencia de Seibersdorf y los resultados confirmaron el valor certificado por la empresa Merck. Los contenidos de uranio y torio fueron estimados por Agency's Laboratories Seibersdorf utilizando fluorimetría y análisis por activación.

Nucleido	Magnitud	Unidad	Incertidumbre 95% C.I.
²³² Th	<4	Bq/kg	--
²³⁵ U	228	Bq/kg	226-230
²³⁸ U	4940	Bq/kg	4910-4970
⁴⁰ K	<0.63	Bq/kg	--
K	<20	mg/kg	--
Th	<1	mg/kg	--
U	400	mg/kg	398-402

Tabla 4.10 IAEA-RGU-1, Uranium Ore.

Nucleido	Magnitud	Unidad	Incertidumbre 95% C.I.
²³² Th	3250	Bq/kg	3160-3340
²³⁵ U	3	Bq/kg	3.3-3.9
²³⁸ U	78	Bq/kg	72-84
⁴⁰ K	63	Bq/kg	3.1-9.5
K	200	mg/kg	100-300
Th	800	mg/kg	784-816
U	6.3	mg/kg	5.9-6.7

Tabla 4.11 IAEA-RGTh-1, Thorium Ore.

Los materiales de referencia IAEA-RGU-1 y IAEA-1-RGTh se prepararon para la Agencia Internacional de la Energía Atómica por el Centro Canadiense de Tecnología Mineral y Energética por dilución de mineral de uranio BL-5 (7.09% U) y un mineral de torio OKA-2 (2.89% Th, 219 µgU/g) respectivamente. El BL-5 se certificó para el uranio, confirmando que el ²²⁶Ra y ²¹⁰Pb están en equilibrio secular radiactivo. El acuerdo entre las mediciones radiométricas y químicas de torio y uranio en OKA-2 demostró que las dos series están en equilibrio radiactivo.

Para realizar la calibración en eficiencia ab initio del detector, para la posterior medida de actividad de las muestras patrón mediante espectrometría gamma, es necesario conocer previamente la geometría, densidad y composición de las muestras.

La geometría con la que se han realizado la adquisición de los espectros de las muestras es la de bote de orina con una altura de muestra de 25 mm. Tal como se dijo en

el apartado 3.3.1, debido a las limitaciones del PENELOPE, se ha realizado la calibración (tanto en PENELOPE como en LabSOCS) suponiendo un vaso cilíndrico equivalente, con la misma altura de la muestra, cuyas dimensiones pueden verse en la figura 3.6 en dicho apartado.

La tabla 4.12 contiene la información necesaria para la calibración, de los materiales de las muestras patrón.

	IAEA-RGK-1	IAEA-RGU-1	IAEA-RGTh-1
Densidad	1.33 g/cm ³	1.1 g/cm ³	1.25 g/cm ³
Composición centesimal	O:36.72%	O:53.80%	O:47.95%
	S:18.40%	Na:0.10%	Si:42.07%
	K:44.87%	Al:0.10%	Th:2.89%
		Si:45.70%	U:7.09%
		Ca:0.10%	
		Fe:0.10%	
		U:0.10%	

Tabla 4.12 Características del material de las muestras.

4.3.2 Calibración en eficiencia ab inicio del detector considerando las muestras patrón

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.068704	0.068433	0.4
62	0.101417	0.101245	0.2
85	0.115698	0.116888	1.0
110	0.116631	0.116678	0.0
135	0.108997	0.109368	0.3
180	0.092919	0.093099	0.2
270	0.066251	0.066069	0.3
450	0.041425	0.041375	0.1
630	0.031083	0.030909	0.6
900	0.023442	0.023040	1.7
1260	0.017607	0.017730	0.7
1800	0.013021	0.012787	1.8

Tabla 4.13 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para **IAEA-RGK-1**.

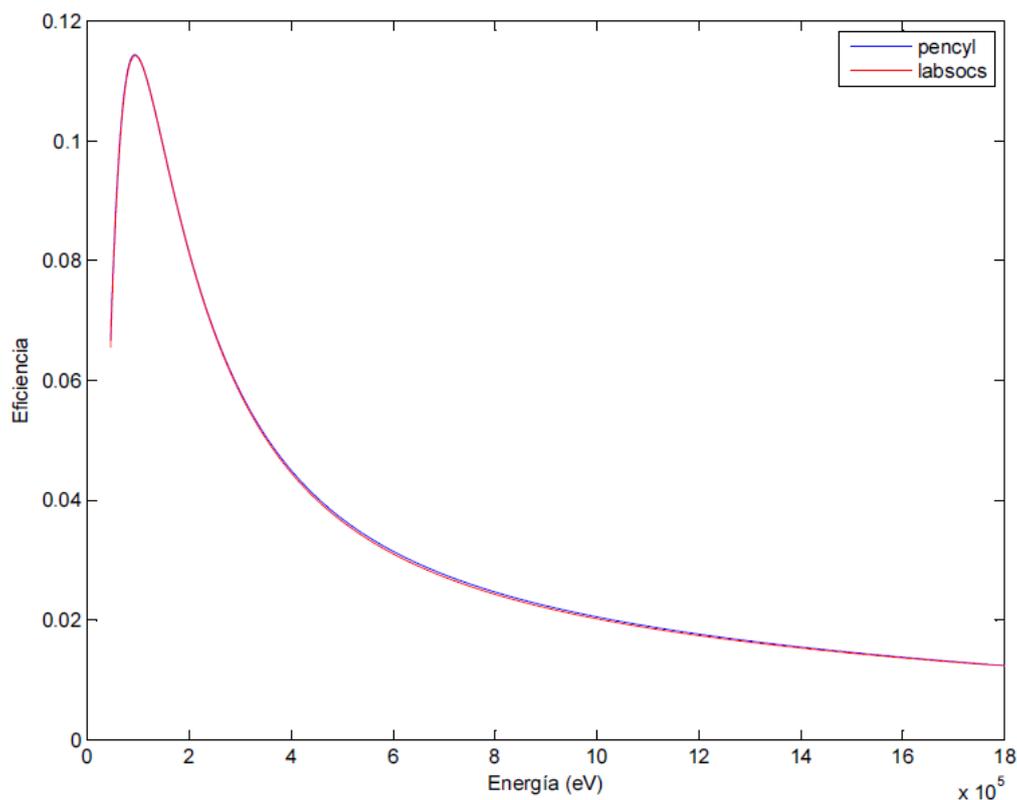


Figura 4.17 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para **IAEA-RGK-1**.

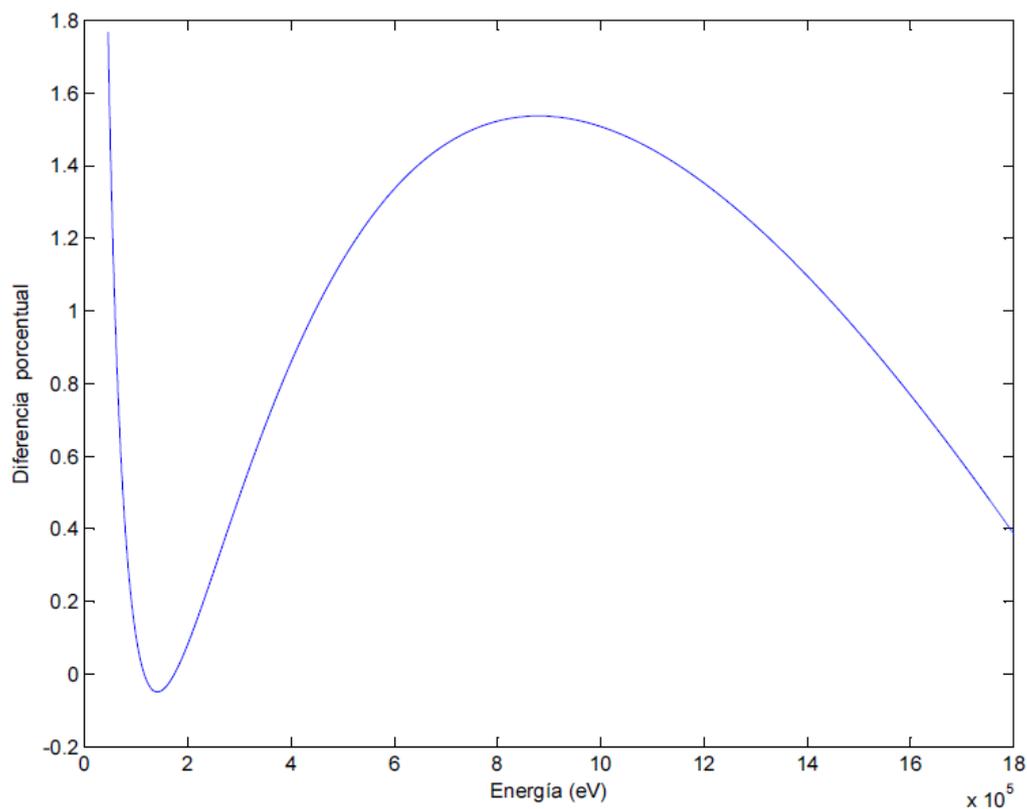


Figura 4.18 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para IAEA-RGK-1.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.066463	0.065817	1.0
62	0.098341	0.097174	1.2
85	0.111315	0.112034	0.6
110	0.112821	0.111754	1.0
135	0.104554	0.104716	0.2
180	0.088233	0.089114	1.0
270	0.063901	0.063243	1.0
450	0.040223	0.039598	1.6
630	0.030248	0.029578	2.3
900	0.022488	0.022049	2.0
1260	0.016904	0.016965	0.4
1800	0.012383	0.012238	1.2

Tabla 4.14 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para IAEA-RGU-1.

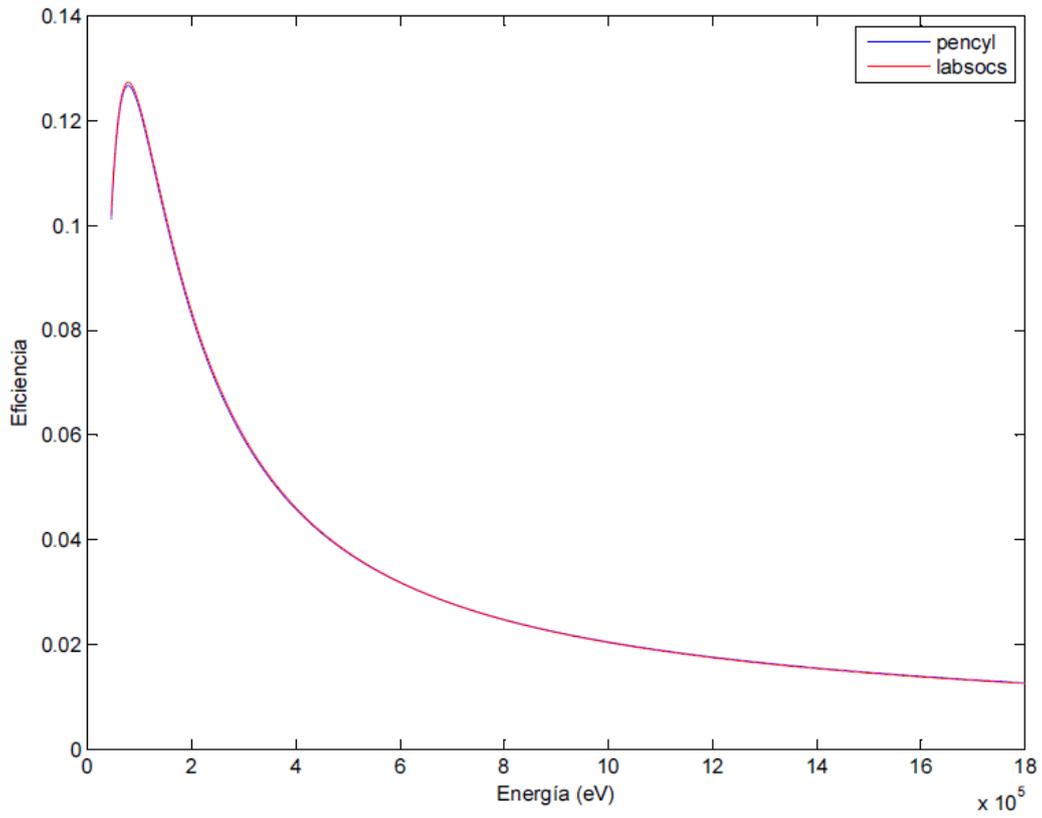


Figura 4.19 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para IAEA-RGU-1.

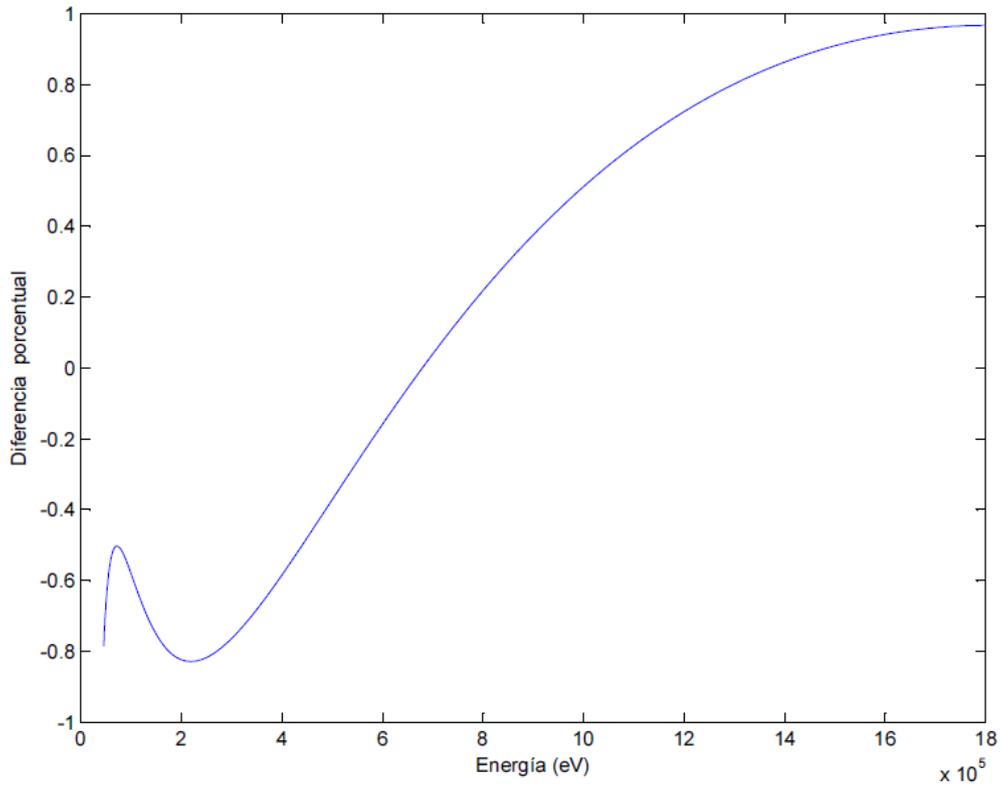


Figura 4.20 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para IAEA-RGU-1.

Energía (keV)	Eficiencia PENELOPE	Eficiencia LabSOCS	Diferencia relativa (%)
45	0.033550	0.033250	0.9
62	0.061918	0.062026	0.2
85	0.089048	0.088903	0.2
110	0.098918	0.099182	0.3
135	0.071972	0.072604	0.9
180	0.074746	0.074351	0.5
270	0.059819	0.059551	0.4
450	0.039290	0.039158	0.3
630	0.029488	0.029541	0.2
900	0.022238	0.022110	0.6
1260	0.017090	0.017030	0.4
1800	0.012258	0.012281	0.2

Tabla 4.15 Eficiencias de fotopicos calculadas mediante PENELOPE y LabSOCS para *IAEA-RGTh-1*.

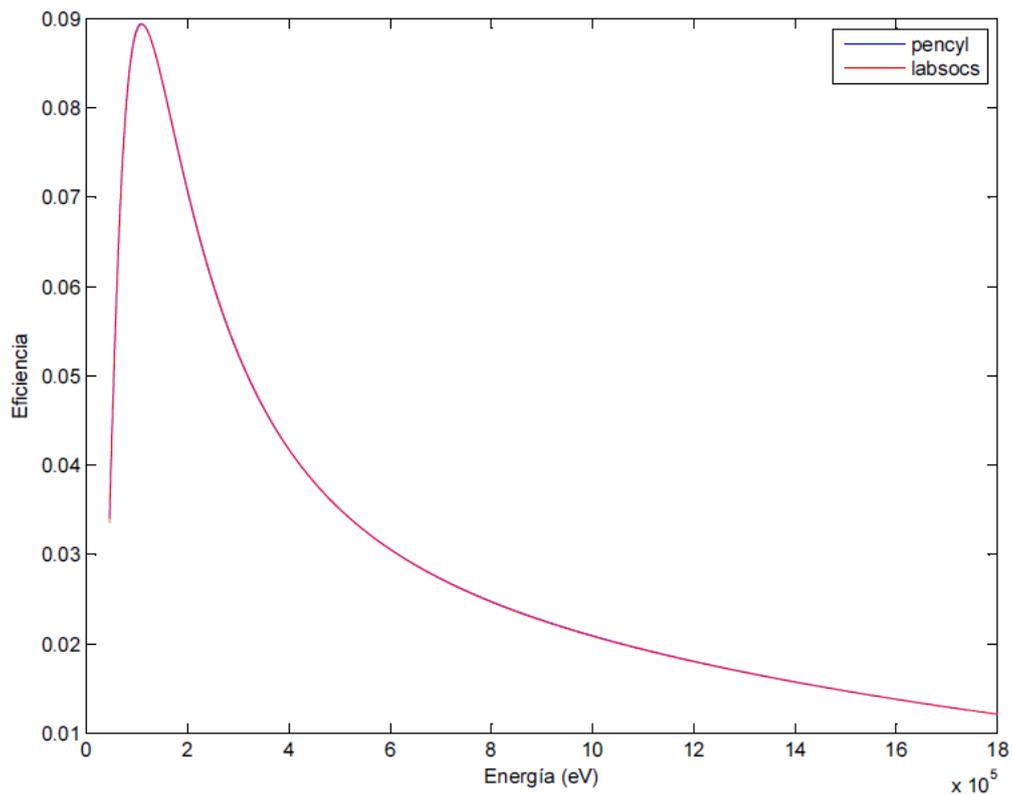


Figura 4.21 Curvas energía-eficiencia PENELOPE vs LabSOCS para *IAEA-RGTh-1*.

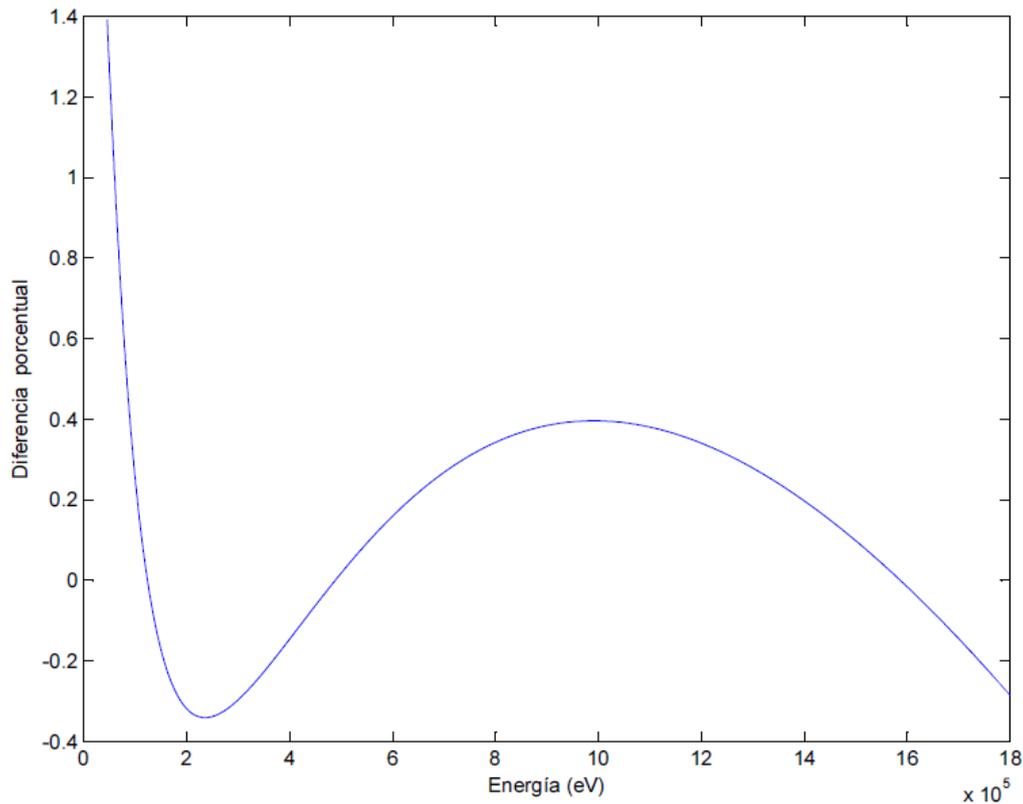


Figura 4.22 Diferencia relativa entre curvas PENELOPE-LabSOCS para IAEA-RGTh-1.

4.3.3 Medición y comparación de actividades

Mediante el equipo de espectrometría gamma descrito en el apartado 3.1, se ha realizado la adquisición de los espectros de las muestras patrón, a partir de los cuales, empleando las calibraciones en eficiencia del apartado 4.3.2, se han calculado las actividades de los radionucleidos cuyas actividades están certificadas.

Para comprobar la bondad de la caracterización a partir de la comparación de las actividades certificadas y las calculadas a partir del análisis espectrométrico se ha empleado un test denominado u-score o u_{test} (Brookes et al.,1979). Para dos medidas, $a \pm u_a$ y $b \pm u_b$, el valor de u_{test} viene dado por la expresión:

$$u_{test} = \frac{|a-b|}{\sqrt{u_a^2+u_b^2}} \quad [4.1]$$

Las interpretaciones del valor de u_{test} varían; Los siguientes límites son aplicados usualmente:

$1.64 > u_{test}$

Los resultados no difieren significativamente.

$1.64 < u_{test} < 1.96$

Los resultados pueden no ser significativamente diferentes pero se requieren más datos para respaldar esta conclusión.

$1.96 < u_{test} < 2.58$

No se puede concluir si los resultados difieren o no sin obtener datos adicionales.

$2.58 < u_{test} < 3.29$

Los resultados pueden ser significativamente diferentes pero se requieren más datos para respaldar esta conclusión.

$3.29 < u_{test}$

Los resultados son significativamente diferentes.

No obstante, según la IAEA los resultados se consideran satisfactorios siempre que no se supere el valor de 2.58.

IAEA-RGK-1

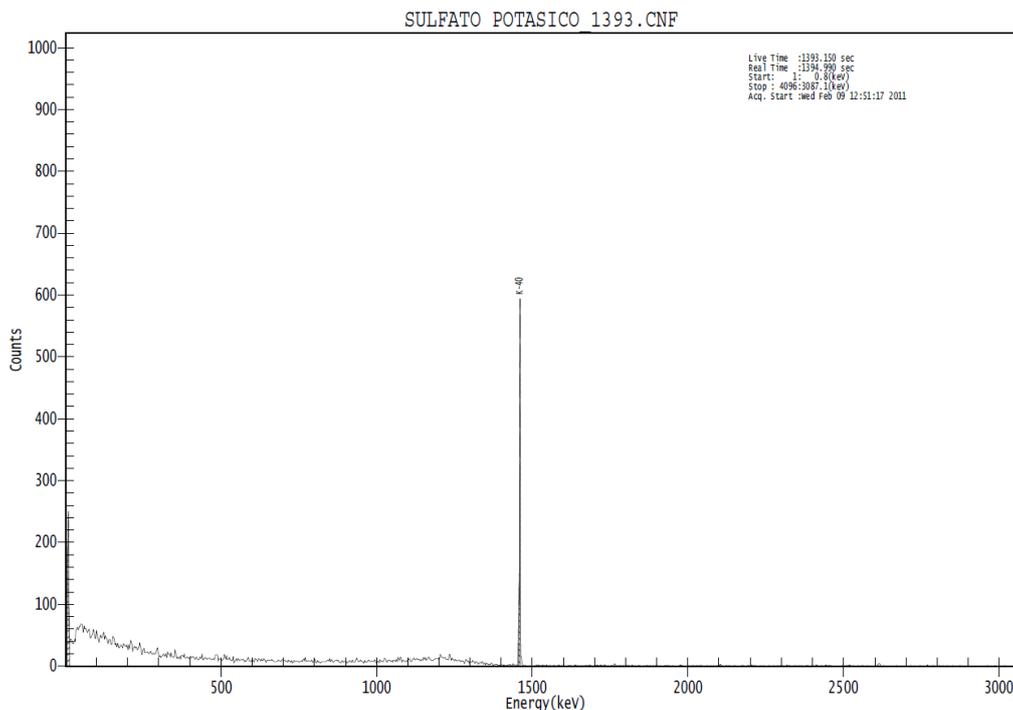


Figura 4.23 Espectro de la muestra IAEA-RGK-1

Nucleido	Energía (keV)	Actividad específica PENELOPE (Bq/kg)	Actividad específica LabSOCS (Bq/kg)	Actividad específica Certificada (Bq/kg)
^{40}K	1460.81	14053±528	14157±677	14000±400

Tabla 4.16 Resultados análisis espectrométrico de la muestra IAEA-RGK-1.

	PENELOPE-LabSOCS	LabSOCS-Certificado	PENELOPE-Certificado
u_{test}	0.12	0.08	0.20

Tabla 4.17 Valor de u_{test} para muestra IAEA-RGK-1.

IAEA-RGU-1

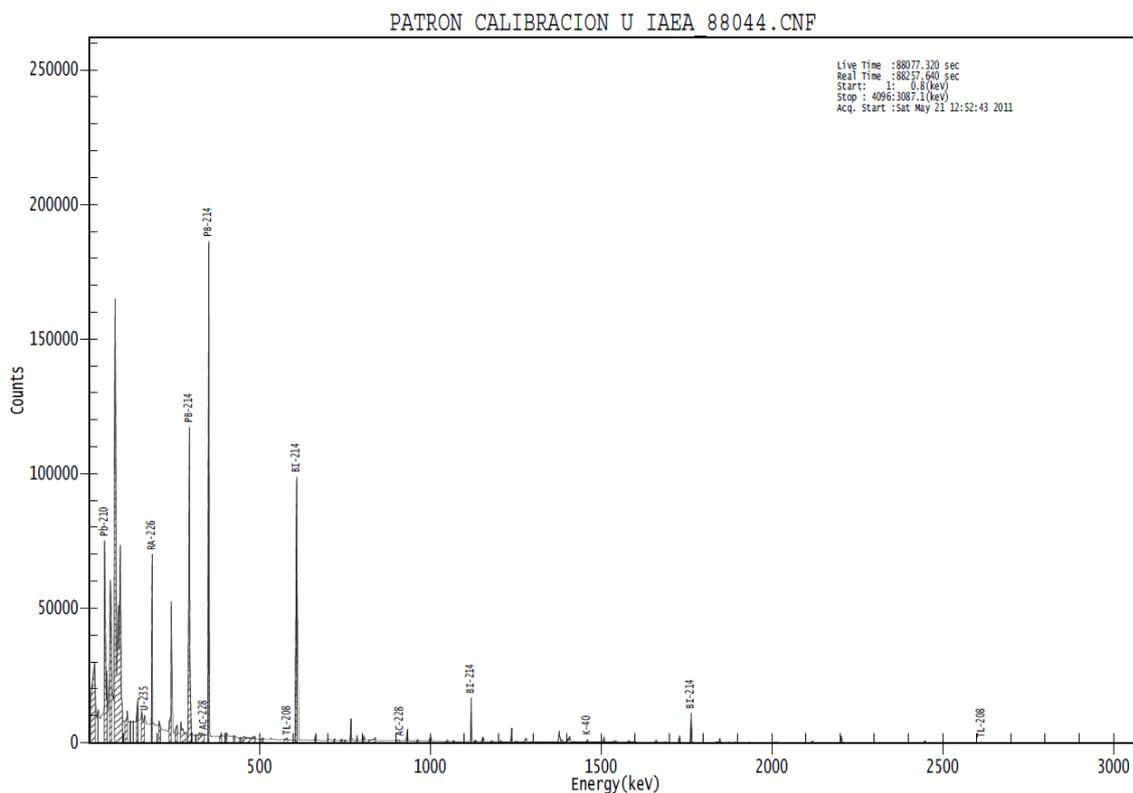


Figura 4.24 Espectro de la muestra IAEA-RGU-1

La actividad específica del ^{238}U se ha calculado a partir de la línea la línea de 351.95 keV del ^{214}Pb , considerando que ambos se encuentran en equilibrio secular (y por lo tanto que sus actividades son iguales).

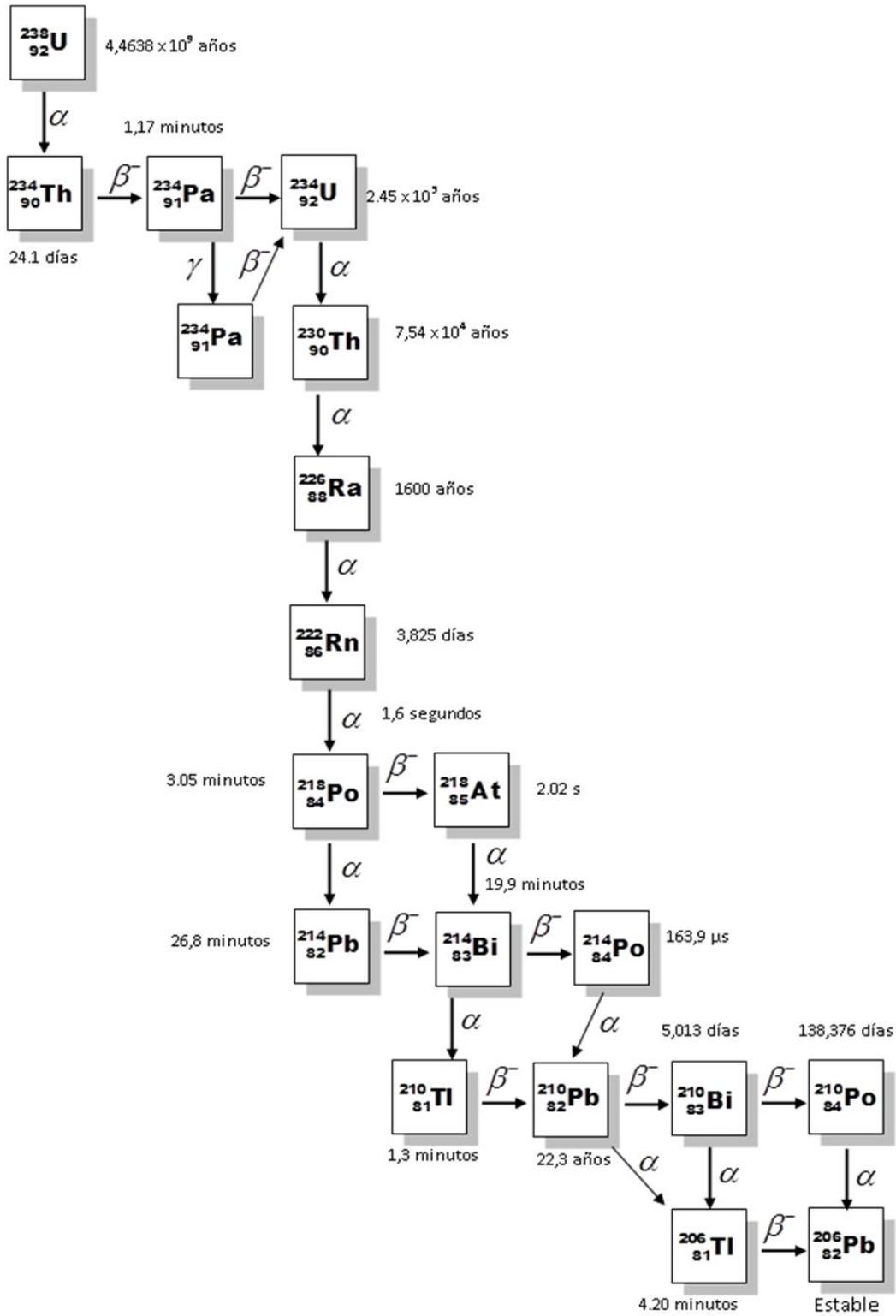


Figura 4.25 Serie radiactiva del ^{238}U

Nucleido	Energía (keV)	Actividad específica PENELOPE (Bq/kg)	Actividad específica LabSOCS (Bq/kg)	Actividad específica Certificada (Bq/kg)
^{214}Pb	351.92	4516 ± 191	4516 ± 320	--
^{238}U	--	4516 ± 191	4516 ± 320	4940 ± 30

Tabla 4.18 Resultados análisis espectrométrico de la muestra IAEA-RGU-1.

	PENELOPE-LabSOCS	LabSOCS-Certificado	PENELOPE-Certificado
u_{test}	0.00	1.32	2.19

Tabla 4.19 Valor de u_{test} para muestra IAEA-RGU-1.

IAEA-RGTh-1

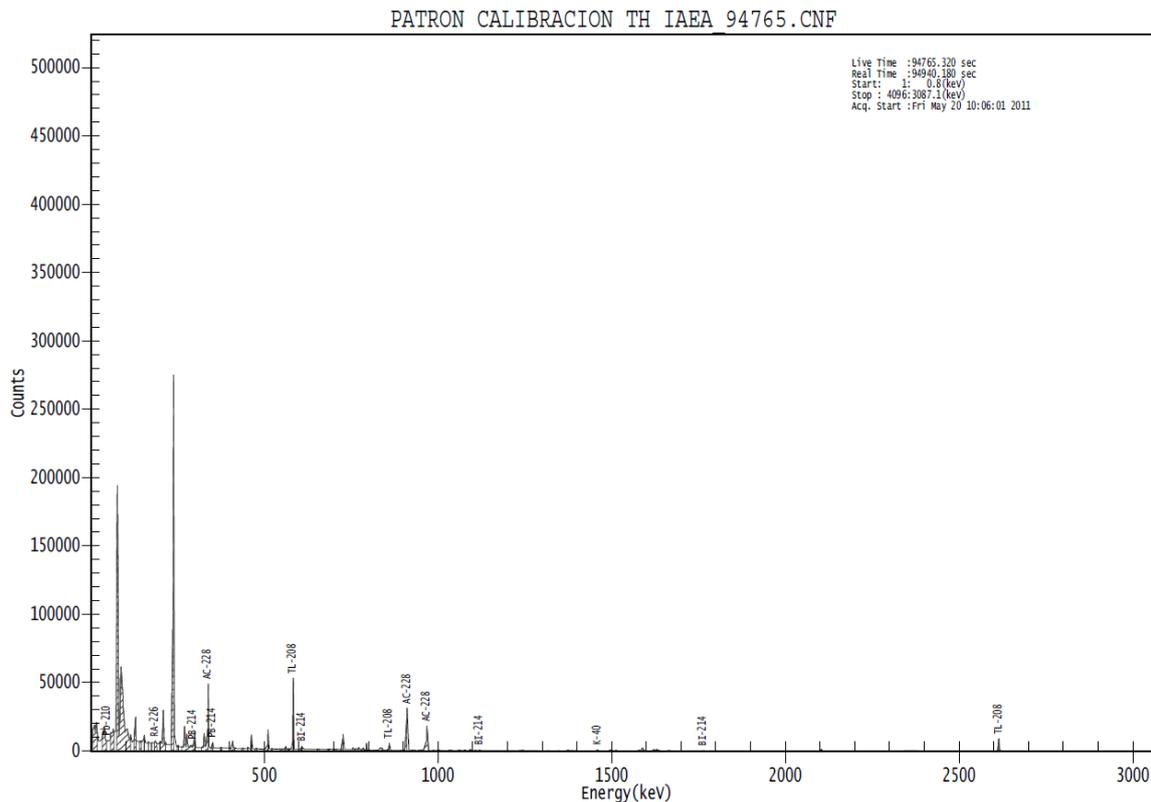


Figura 4.26 Espectro de la muestra IAEA-RGTh-1

En la figura 4.27 se puede observar la serie radiactiva del ^{232}Th . La actividad específica del ^{232}Th ha sido calculada a partir de la línea de emisión de 2614.5 keV del ^{208}Tl . Para ello se ha considerado que el ^{212}Bi se encuentra en equilibrio secular con el ^{232}Th , y se ha tenido en cuenta que en el 33.7 % de las ocasiones en que se produce la desintegración del ^{212}Bi , éste decae al ^{208}Tl .

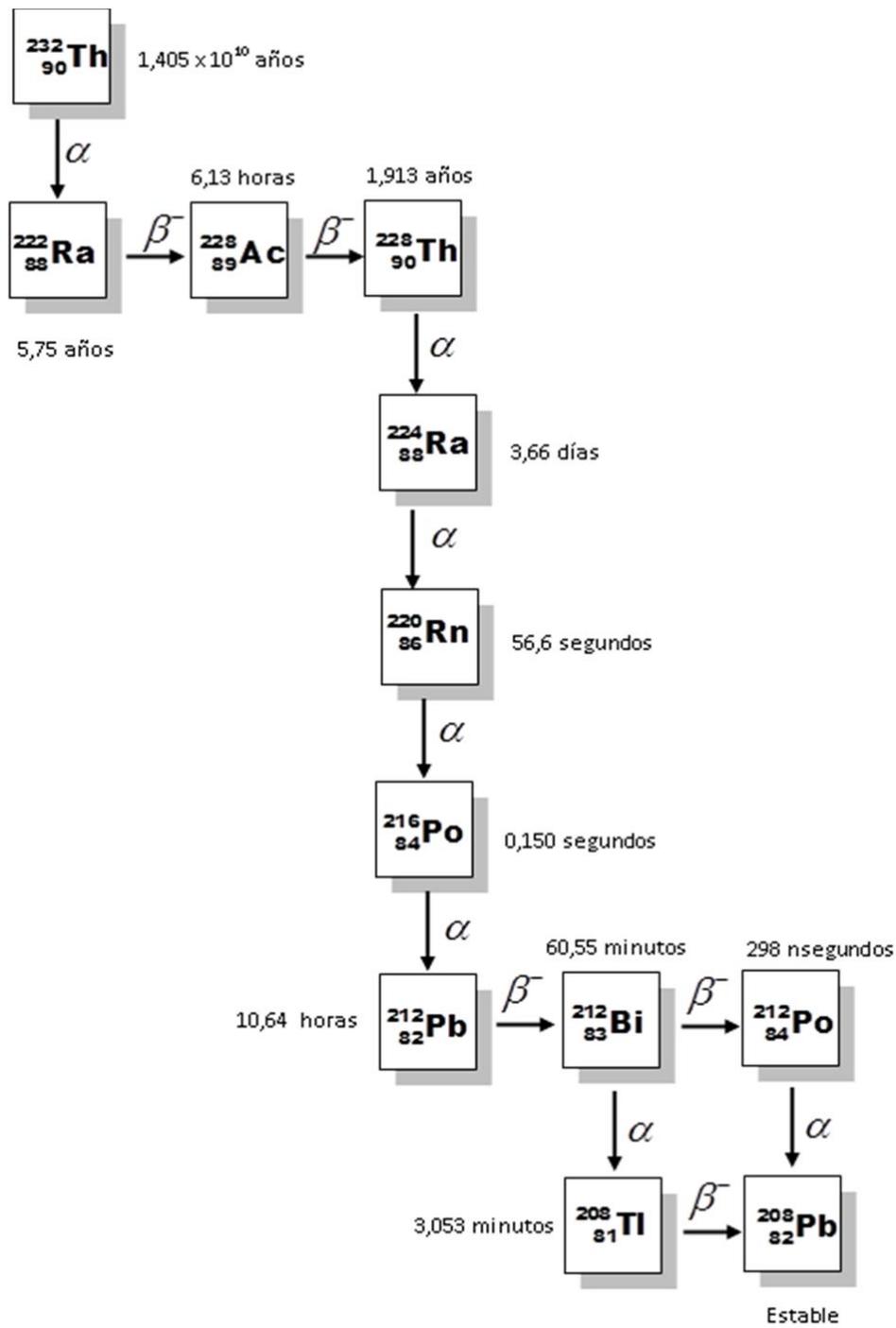


Figura 4.27 Serie radiactiva del ^{232}Th

Nucleido	Energía (keV)	Actividad específica PENELOPE (Bq/kg)	Actividad específica LabSOCS (Bq/kg)	Actividad específica Certificada (Bq/kg)
²⁰⁸ Tl	2614.5	1.141±162	1138±46	--
²³² Th	--	3386±481	3376±85	3250±90

Tabla 4.20 Resultados análisis espectrométrico de la muestra **IAEA-RGTh-1**.

	PENELOPE-LabSOCS	LabSOCS-Certificado	PENELOPE-Certificado
u_{test}	0.02	1.02	0.28

Tabla 4.21 Valor de u_{test} para muestra **IAEA-RGTh-1**.

5. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

5.1 Conclusiones

Las principales conclusiones a las que se ha llegado en este Trabajo Fin de Master, se puede resumir en los siguientes puntos:

- Se ha cumplido con el objetivo del TFM de desarrollar un procedimiento de caracterización computacional para el detector HPGe XtRa, implementando conjuntamente un algoritmo evolutivo en Matlab (evolución diferencial) junto con un código de simulación Montecarlo (PENELOPE). Mediante el algoritmo evolutivo se han obtenido las características geométricas del detector que minimizan la diferencia entre las eficiencias de fotopico de referencia y las calculadas mediante el código PENELOPE. La caracterización se ha realizado considerando una muestra de agua destilada en un recipiente de polietileno de 47.9 mm de diámetro interno y con una altura de muestra de 25 mm.
- El procedimiento desarrollado está ideado para caracterizar el detector tomando como eficiencias de fotopico de referencia, las obtenidas experimentalmente de la medida de la actividad de muestras patrón. No obstante, debido a la dificultad que acarrea la calibración experimental, se ha considerado que para el desarrollo y validación del procedimiento es suficiente con emplear como referencia las eficiencias calculadas mediante el software LabSOCS, en el cual se encuentra caracterizado el detector.
- Se ha validado la caracterización mediante la realización de calibraciones ab initio para muestras de agua destilada con geometrías distintas a las empleadas en la caracterización (distintas alturas y para distintos diámetros del recipiente), mediante PENELOPE y LabSOCS. Se ha podido observar que las diferencias relativas entre los resultados obtenidos a partir de ambos programas de simulación Montecarlo no superan, en ningún caso, el 3.8%. Este valor es inferior a la incertidumbre mínima considerada en LabSOCS (4% para energías por encima de los 900 keV), basada en la experimentación, lo que demuestra la bondad de la caracterización frente a cambios en la geometría de la muestra.
- Se han realizado calibraciones ab initio mediante LabSOCS y PENELOPE, para materiales distintos al considerado durante la caracterización (con distinta densidad y composición centesimal), concretamente los correspondientes a unas

muestras patrón de certificadas por la IAEA. En este caso la máxima diferencia relativa observada entre las eficiencias calculadas por ambos programas es del 2.3% por lo que se puede afirmar que la caracterización es también buena frente a cambios del material de la muestra.

- Para validar definitivamente la caracterización se han realizado medidas de actividad a partir de la calibración ab initio de las muestras patrón de la IAEA. Se han realizado análisis de los espectros adquiridos de dichas muestras y se han comparado los resultados de los análisis espectrométricos con las actividades certificadas de las muestras, mediante el u_{test} , cuyo valor no ha superado el límite establecido por la IAEA ($u_{\text{test}}=2.58$), y por lo tanto concluyéndose que los resultados pasan el test.

5.2 Líneas futuras

En lo que se refiere a las líneas futuras, se pueden citar como inmediatas las siguientes:

- Mejorar el modelo simplificado del detector XtRa de Canberra, incluyendo el soporte de sujeción del cristal. Este soporte está fabricado normalmente de cobre, o de aleación de aleación de aluminio. Dado que se desconocen sus dimensiones, éstas formarán parte de las variables del problema de optimización. Aunque la inclusión o no de este soporte, no influye de manera determinante en la respuesta del detector, ante la radiación emitida por muestras situadas en la parte superior del detector (tal como se ha considerado en este trabajo), si es importante considerarlo a la hora de calibrar en eficiencia para recipientes tipo Marinelli (Marinelli, et. al., 1950), los cuales envuelven al detector.
- Emplear el procedimiento desarrollado en este trabajo para caracterizar un detector de HPGe tipo pozo, modelo GCW4023 7500SL de la marca Canberra, que ha sido adquirido recientemente por el grupo GIRMA. Dicha caracterización se realizará tomando como referencia las eficiencias obtenidas de la calibración experimental del detector a partir de muestras patrón. Este detector ofrece la máxima eficiencia para muestras pequeñas ya que la muestra está prácticamente rodeada por el material detector activo. Canberra no ha

diseñado un procedimiento para caracterizar este detector para que puedan realizarse calibraciones ab initio mediante LabSOCS, por lo que el procedimiento ideado en este trabajo presenta una buena oportunidad de puesta en funcionamiento de este detector.

REFERENCIAS

- BRIESMEISTER, J. F. 2000. MCNP- a general Monte Carlo N-particle transport code, Version 4C. Los Alamos National Laboratory, CCC-700. *Los Alamos, New Mexico*.
- BROOKES, C., BETTELEY, I. & LOXTON, S. 1979. Fundamentals of mathematics and statistics. *John Wiley, New York*.
- CANBERRA 2002. Genie-2000 Basic Spectroscopy Software Version 2.1.
- DEBERTIN, K. & R.G., H. 1988. Gamma and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors. *North Holland, Amsterdam*.
- MARINELLI, L.D., HILL, R. F., HINE, G. J. 1950. The Quantitative Determination of Gamma Radiation in Biological Research," *American Journal of Roentgenology*, vol. 63, pp. 160-169, 1950.
- SALVAT, F., FERNANDEZ VAREA , J. M., SEMP AU, J. 2006. PENELOPE, A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. *OECD ISBN 92-64-02301-1*.
- STORN, R. & PRICE, K. 1997. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, 11, 341–359.
- ZHANG, J. & SANDERSON, A. 2009. Adaptive Differential Evolution: A Robust Approach to Multimodal Problem Optimization, chapter Theoretical Analysis of Differential Evolution.