

Intercomparaison européenne d'utilisateurs de codes Monte Carlo pour le calcul d'incertitudes sur le kerma dans l'air déterminé dans un faisceau de césium-137

L. de CARLAN¹, J.-M. BORDY¹, J. GOURIOU¹

(Manuscrit reçu le 20 septembre 2010, accepté le 3 mars 2011)

RÉSUMÉ Dans le cadre du projet européen CONRAD (COordinated Network for RAdiation Dosimetry, contrat FP6-12684) coordonné par EURADOS (EUropean RAdiation DOSimetry group), le groupe de travail numéro 4 avait pour objectif de s'intéresser à la dosimétrie numérique avec une action particulière appelée "Uncertainty assessment in computational dosimetry : an intercomparison of approaches". Le principe de cette action était de proposer à la communauté internationale huit exercices de modélisation traitant de domaines variés concernant le transport du rayonnement (photons, neutrons, protons et électrons). Le but de cet article est de présenter l'exercice n° 4 traitant de la simulation d'un faisceau de ¹³⁷Cs pour le calcul du kerma dans l'air. Il avait pour objectif principal d'estimer l'incertitude sur la valeur du kerma dans l'air en prenant en compte des composantes de celle-ci non accessibles à la mesure, notamment celles dues aux différents paramètres de la géométrie : position de la source, diamètre du collimateur, densité des matériaux, etc. 12 instituts de 10 pays différents ont participé à cet exercice montrant l'intérêt de cette proposition.

ABSTRACT European comparison of Monte Carlo codes users on the uncertainty calculations of air kerma determined in front of a cesium-137 beam.

Within the framework of the European project CONRAD (COordinated Network for RAdiation Dosimetry, contract FP6-12684) coordinated by EURADOS (EUropean RAdiation DOSimetry group), WP4 was devoted to numerical dosimetry under the title "Uncertainty assessment in computational dosimetry: an intercomparison of approaches". Within this activity, a working group sent a list of eight exercises, dealing with radiation transport of photons, neutrons, protons and electrons, to be solved by the international community. This paper presents exercise number 4, dealing with the calculation of air kerma for a ¹³⁷Cs beam. This problem was aimed at estimating the components of the uncertainty on the air kerma which cannot be measured, namely those due to geometrical data such as the source location, the diameter of the collimator, the material density, etc. 12 institutes of 10 different countries took part in this work, showing the interest in this proposal.

Keywords : Monte Carlo Modeling / uncertainty / air kerma

¹ CEA, LIST, Laboratoire National Henri Becquerel, Laboratoire de Métrologie de la Dose, 91191 Gif-Sur-Yvette Cedex, France.

1. Introduction

La modélisation dans le domaine de la dosimétrie a pris une part de plus en plus importante pour deux raisons majeures : la première est que les moyens expérimentaux sont plus difficiles à mettre en œuvre qu'auparavant et la seconde tient au fait que les moyens de calculs se sont considérablement améliorés ces dix dernières années. Cela est particulièrement vrai dans l'utilisation des codes de calculs basés sur la méthode de Monte Carlo qui nécessitent des systèmes de calculs performants. La mise à disposition de calculateurs puissants, rapides et accessibles à un grand nombre a permis une démocratisation de l'utilisation de ces codes. Cependant, l'utilisation de ceux-ci nécessite une bonne expertise afin d'avoir confiance dans les résultats obtenus et de pouvoir les évaluer correctement. Dans le cadre de l'utilisation de ces codes Monte Carlo, une action européenne a été initiée afin de réaliser une comparaison sur l'utilisation de différents codes. Cette action a été réalisée dans le cadre du projet européen CONRAD (COordinated Network for RADIation Dosimetry, contrat FP6-12684). Afin de mettre en place cette comparaison, l'association EURADOS (EUropean RADIation DOSimetry group) a été chargée de cette tâche. Au sein d'EURADOS, le groupe de travail numéro 4 s'intéressait à la dosimétrie numérique avec une action particulière appelée "Uncertainty assessment in computational dosimetry: an intercomparison of approaches". Huit exercices de modélisation traitant de domaines variés concernant le transport du rayonnement (photons, neutrons, protons et électrons) ont été proposés. Le but de cet article est de présenter l'exercice n° 4 traitant de la simulation d'un faisceau de ^{137}Cs pour le calcul du kerma dans l'air. L'objectif principal est d'estimer l'incertitude sur la valeur du kerma dans l'air en prenant en compte des composantes de celle-ci non accessibles à la mesure, notamment celles dues aux différents paramètres de la géométrie : position de la source, diamètre du collimateur, densité des matériaux, etc. L'attrait principal de cet exercice est de pouvoir appliquer les calculs dans un exercice concret dont la géométrie est relativement simple à mettre en œuvre.

2. Matériels et méthodes

2.1. Présentation de l'exercice

Le kerma dans l'air est une grandeur dosimétrique physique qui est utilisée pour l'établissement des références métrologiques notamment en radioprotection. Le kerma est une grandeur ponctuelle qui s'applique aux particules non directement ionisantes (en particulier photons et neutrons). Il correspond à l'énergie du rayonnement incident qui est transférée à la matière, rapportée à l'unité de masse de matière considérée. De cette grandeur primaire, il est possible d'obtenir les

équivalents de dose ambiant, personnel et directionnel, ce qui souligne l'intérêt de cet exercice.

2.1.1. Géométrie

La géométrie de l'irradiateur à modéliser est présentée sur la [figure 1](#). Cet irradiateur est spécifiquement dévolu à l'établissement de références dosimétriques dans les laboratoires de métrologie. Les caractéristiques des matériaux et les données nucléaires étaient fournies. Le calcul du kerma dans l'air était fondé sur l'utilisation des coefficients de conversion de la fluence des photons vers le kerma dans l'air, les données étant extraites de l'ICRU 57 (ICRU 57, 1998). Le point de mesure est défini à 50 cm du centre de la partie radioactive de la source.

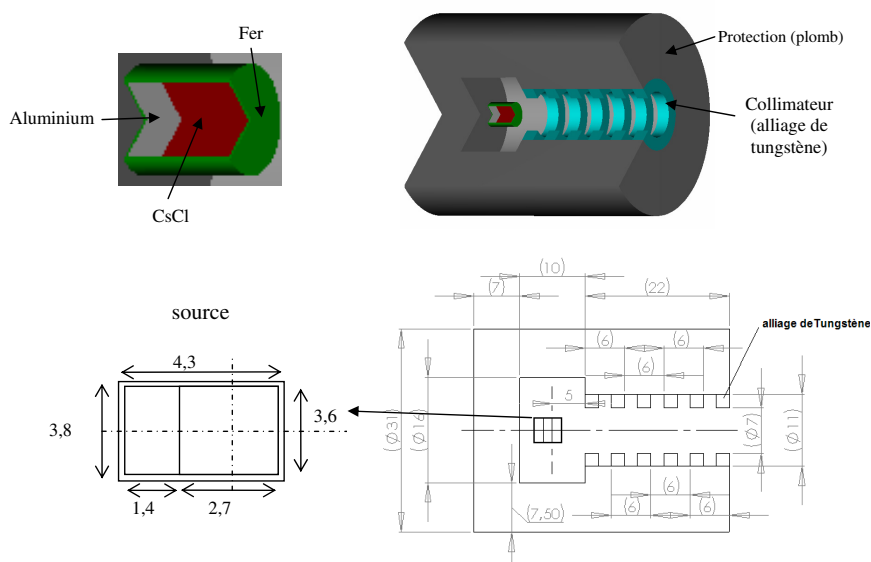


Figure 1 – *Vue en coupe et en trois dimensions de l'irradiateur et de la source de ^{137}Cs (distances exprimées en cm).*

Cut view and 3D view of the irradiator and the ^{137}Cs source (distance unit: cm).

2.1.2. Problèmes posés aux participants

Cinq problèmes étaient adressés aux participants dans cet exercice, mais seulement deux d'entre eux sont présentés car ils sont d'un plus grand intérêt. Il s'agit, d'une part, d'effectuer le calcul du kerma dans l'air à 50 cm (appelé

également par la suite « kerma de référence ») de la source (exprimé en Gy/photon émis) et, d'autre part, d'estimer son incertitude associée en faisant varier de nombreux paramètres.

2.2. Méthode de résolution proposée

Afin de pouvoir estimer le bilan d'incertitudes sur la valeur du kerma dans l'air, l'approche proposée consiste à faire varier chaque paramètre séparément. La difficulté principale est de pouvoir détecter une faible variation du kerma due à une faible variation d'un paramètre donné sans pour autant avoir des durées de calculs trop élevées. L'approche proposée pour résoudre ce problème est la suivante (voir Fig. 2) :

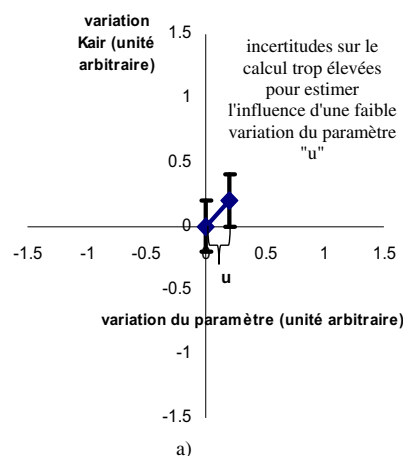


Figure 2 – Méthode d'évaluation de l'incertitude. En (a), l'incertitude associée au calcul du kerma ne permet pas d'estimer l'influence de la variation du paramètre « u » sur le calcul du kerma. En (b), l'intervalle de variation de « u » jusqu'à $\pm \Delta X$ est augmenté artificiellement pour faire apparaître cette variation, puis $\Delta K_{air} = (\partial k_{air} / \partial x) * u$ est déterminé.

Method for assessing the uncertainty. In (a), the uncertainty on air kerma calculation does not allow to assess the influence of "u" parameter on Kair. In (b) the increase of "u" up to $\pm \Delta X$ in order to assess the Kair variation and then one calculates $\Delta K_{air} = (\partial k_{air} / \partial x) * u$.

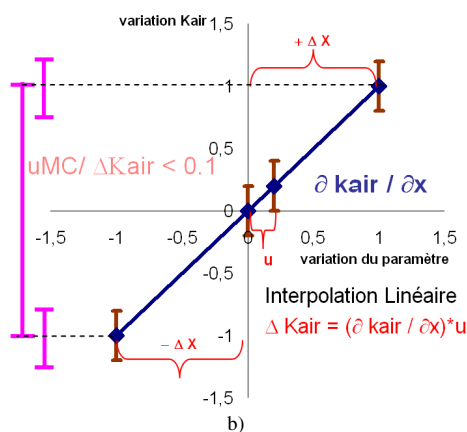


TABLEAU I
Liste des paramètres utilisés pour le calcul de l'incertitude sur le kerma dans l'air.
List of parameters used for the calculation of the air kerma uncertainty.

Paramètre x	Variation du paramètre dans le calcul		Variation estimée sur le paramètre *	Incertitude type sur le paramètre	
	Δx	$\partial k_{\text{air}}/\partial x$		u	Δk_{air}
Position de la source (décalage /axe)	$+\Delta x/2$		+0,05 cm	$0,1 / 2\sqrt{3}$	$(\partial k_{\text{air}}/\partial x) \cdot u$
Volume de la chambre (profondeur)	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,2$ cm	$0,4 / 2\sqrt{3}$	
Anneaux du collimateur (diamètre)	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,05$ cm	$0,1 / 2\sqrt{3}$	
Densité de l'alliage de tungstène	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,2$ g/cm ³	$0,4 / 2\sqrt{3}$	
Densité du CsCl	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,2$ g/cm ³	$0,4 / 2\sqrt{3}$	
Position de la source (profondeur)	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,1$ cm	$0,2 / 2\sqrt{3}$	
Volume de la chambre (diamètre)	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,05$ cm	$0,1 / 2\sqrt{3}$	
Longueur des anneaux du collimateur	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,05$ cm	$0,1 / 2\sqrt{3}$	
Densité de l'aluminium	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,05$ g/cm ³	$0,1 / 2\sqrt{3}$	
Densité du fer	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,05$ g/cm ³	$0,1 / 2\sqrt{3}$	
Densité du plomb	$\pm (\Delta x/2)$		$\pm 0,1$ g/cm ³	$0,2 / 2\sqrt{3}$	
Énergie de coupure*	$\pm (\Delta x/2)$				
Sections efficaces et modèles physiques **					

* Incertitude pouvant être issue de données de la littérature, de livres, d'expériences...

** Paramètres qui peuvent introduire un biais.

- (1) augmenter l'amplitude du paramètre à faire varier de manière à pouvoir obtenir une différence significative par rapport à la valeur du kerma de référence sans avoir une durée de calcul trop importante (colonne 2, Tab. I),
- (2) calculer la pente exprimant la variation du kerma dans l'air par rapport au paramètre considéré ($\partial k_{\text{air}}/\partial x$, colonne 3, Tab. I) pourvu que $u_{\text{MC}}/\Delta k_{\text{air}} < 0,1$. Ce critère est très important puisqu'il signifie que la variation du kerma observé doit être dix fois plus importante que l'incertitude statistique sur le calcul Monte Carlo (u_{MC}). Autrement dit, cela signifie que l'influence de l'incertitude de calcul est négligeable devant la variation du kerma. Le calcul est fait en supposant que la variation du kerma est linéaire avec le paramètre étudié ($\partial k_{\text{air}}/\partial x$ constante dans l'intervalle $\pm \Delta X$), voir figure 2,
- (3) calculer l'incertitude standard (u, colonne 5, Tab. I). Ce calcul dépend du type de la distribution considérée, de type gaussienne, triangulaire ou rectangulaire, voir ISO 13005 (ISO 13005, 1995) et correspond à la variation du paramètre dx considéré. Par exemple, pour une variation de distance de

la source de 1 mm, $u = 2 \cdot dx / (2\sqrt{3})$ en considérant une distribution rectangulaire,
(4) calculer $\Delta k_{air} = (\partial k_{air} / \partial x) \cdot u$.

2.3. Approche utilisée par les auteurs

Afin de résoudre l'exercice, les auteurs ont utilisé le code Monte Carlo MCNP (Monte Carlo N-Particle) développé à l'origine pour le transport des neutrons. La version 4c2 (Briesmeister, 2000) du code a été utilisée pour réaliser les calculs. Diverses possibilités ont été étudiées pour calculer la distribution spectrale de la fluence des photons et donc le kerma dans l'air. Chaque type de donnée de sortie fourni par le code MCNP est appelé « tally ». Pour l'exercice, les tally F2 (fluence moyennée sur une surface), F4 (fluence moyennée dans un volume) et F5 (détecteur point) ont été comparés dans une géométrie simplifiée. Il a été observé une différence inférieure à 0,1 % entre les trois tally. Étant donné que le calcul du tally F5 est beaucoup plus rapide, c'est ce tally qui a été systématiquement utilisé par la suite.

Pour calculer le kerma dans l'air à partir de la fluence, l'instruction « DE-DF » de MCNP a été utilisée : elle permet de multiplier directement la fluence obtenue dans chaque classe d'énergie par le coefficient de conversion adapté selon une interpolation Log-Log. L'instruction « PHYS » qui paramètre les choix du transport des particules a été utilisée avec les options par défaut. Le mode de transport choisi est le mode P qui permet de considérer un dépôt local d'énergie des électrons secondaires. Le temps de calcul de chaque valeur est d'environ 840 minutes sur un ordinateur cadencé à 3,2 GHz (1 Go de mémoire vive). La solution des auteurs n'a pas été prise comme référence, mais simplement ajoutée à la comparaison de tous les résultats collectés. La valeur du kerma dans l'air obtenue par les auteurs dans la configuration de référence est de $8,17660 \times 10^{-5}$ (+/- 0,01 %) pGy/particule émise.

2.4. Résultats et discussion

Dans cet exercice, 12 instituts de 10 pays différents ont participé : Royaume-Uni (1), République Tchèque (1), États-Unis (2), Russie (1), Allemagne (1), Pologne (1), Espagne (1), Suisse (1), Portugal (1), France (2). Les codes utilisés étaient principalement de la famille MCNP-MCNPX avec également deux codes Monte Carlo « faits maison » (Fig. 3).

2.4.1. Calcul du kerma de référence

Les résultats sont présentés sur la figure 4 sous forme d'écart relatif par rapport à la moyenne des résultats collectés, en excluant le participant (b). L'écart-type

INTERCOMPARAISON EUROPÉENNE D'UTILISATEURS DE CODES MONTE CARLO

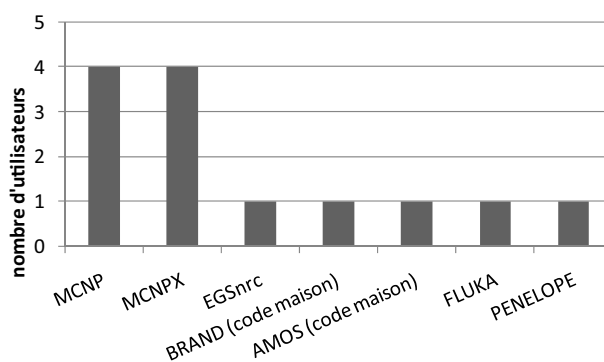


Figure 3 – Codes Monte Carlo utilisés par les participants.
 Monte Carlo codes used by the participants.

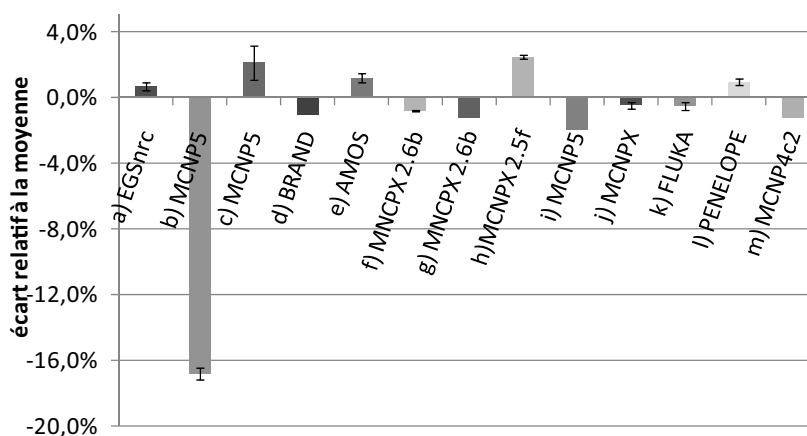


Figure 4 – Écart relatif, exprimé en % par rapport à la moyenne de tous les participants sauf (b), entre les participants pour le calcul du kerma dans l'air de référence.
 Relative deviation, expressed in percent as the ratio to mean of all participants except (b), between the participants for the calculation of reference air kerma.

obtenu est d'environ 1,4 %, ce qui est plutôt satisfaisant et montre que la géométrie et les paramètres de simulation pris par les participants sont traités de façon identique. Des investigations approfondies pour le cas du participant (b) ont montré qu'il y avait une erreur de modélisation de la source car le cylindre où est opéré le tirage de la localisation initiale des particules était orienté dans un axe perpendiculaire à celui du cylindre radioactif.

2.4.2. Estimation du bilan d'incertitudes

(a) Calcul de la variation du kerma

Pour comparer les résultats, l'analyse a été réalisée de différentes manières. La première comparaison a consisté à suivre l'évolution de $\partial k_{air}/\partial x$ qui correspond à la colonne 3 du [tableau I](#) pour chaque paramètre étudié et pour chaque participant. Les résultats sont présentés sur la [figure 5](#) (la ligne joignant les points n'a pas de signification physique mais sert simplement de guide). Il existe un accord satisfaisant entre les données de certains participants mais pour d'autres, les différences peuvent atteindre plusieurs ordres de grandeur. Cela est très surprenant en sachant que la valeur du kerma de référence était concordante. Afin de mieux comprendre les écarts constatés, il a été décidé de s'intéresser au paramètre $u_{MC}/\Delta k$.

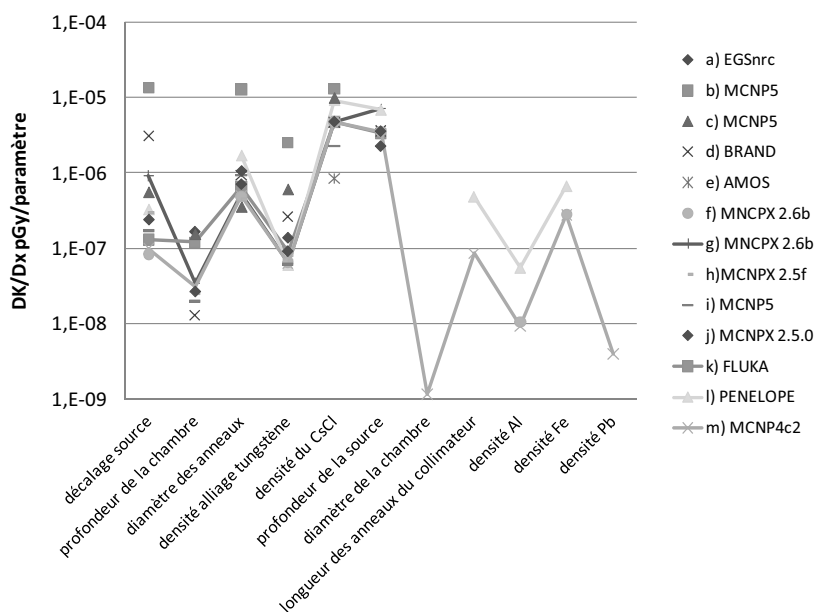


Figure 5 – Valeurs de $\partial k_{air}/\partial x$ en fonction des paramètres ajustables étudiés et des participants.
 $\partial k_{air}/\partial x$ values as function of the different studied parameters and participants.

(b) $u_{MC}/\Delta k$ pour tous les participants

Le rapport $u_{MC}/\Delta k$ est un bon indicateur de la fiabilité de la simulation. Ce rapport permet de comparer la variation du kerma et l'incertitude liée à la simulation. La

figure 6 présente ces rapports. Il apparaît que la moitié des calculs ne passent pas le critère $u_{MC}/\Delta k < 0,1 \%$. Cela signifie que pour la moitié des calculs, l'incertitude est trop élevée pour conclure à l'influence du paramètre étudié sur la variation du kerma. Cela peut s'expliquer par le fait que les temps de calculs sont très longs et que le nombre de paramètres à étudier était important. Cela signifie, par ailleurs, que le bilan d'incertitude global ne peut être calculé de façon satisfaisante dans ces conditions. Cependant, les écarts observés entre les participants ne s'expliquent pas uniquement par une incertitude sur le calcul trop élevée. Toutes les raisons n'ont pu être clairement établies mais il semble que la méthodologie proposée n'a pas été totalement respectée.

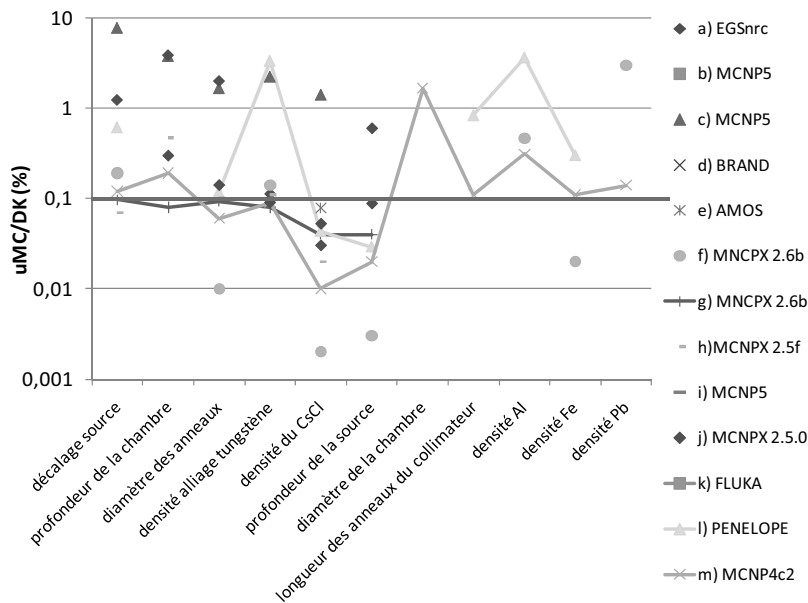


Figure 6 – Valeurs de $u_{MC}/\Delta k$ en fonction des paramètres ajustables étudiés et des participants.
 $u_{MC}/\Delta k$ values as function of the different studied parameters and participants.

(c) Bilan d'incertitudes global

La figure 7 présente la contribution relative de chaque paramètre au bilan d'incertitude (exprimée en pourcentage). Les deux principaux paramètres qui influencent le bilan total sont la masse volumique de la source et la position de celle-ci. D'un autre côté, la profondeur de la chambre, les densités de l'aluminium et du plomb ainsi que la largeur de la cavité interne de l'irradiateur n'ont qu'une

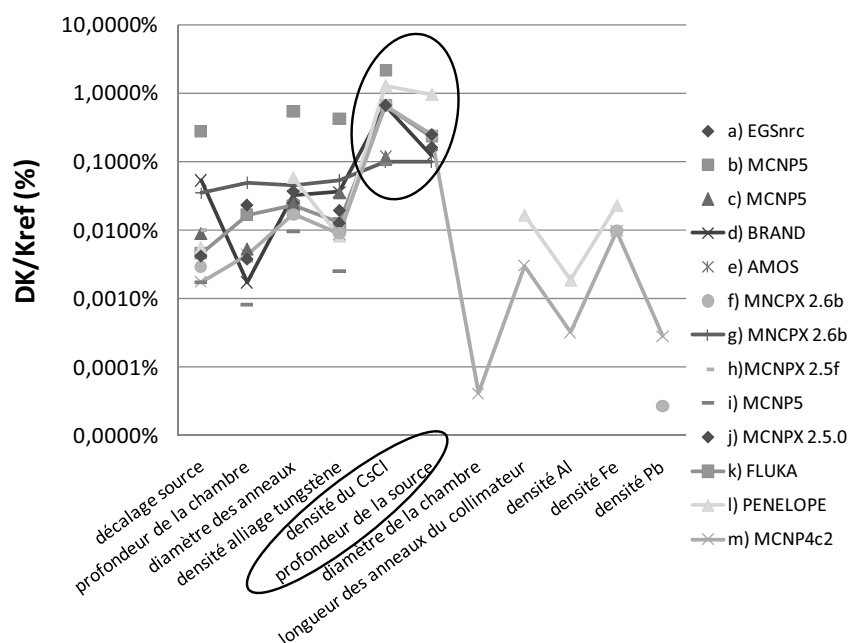


Figure 7 – Contribution relative de chaque paramètre étudié à l'incertitude sur le kerma de référence dans l'air.

Relative contribution of the studied parameters to the reference air kerma uncertainty.

influence très mineure. L'incertitude totale est d'environ 0,7 % ($k = 1$) pour la solution proposée par les auteurs. La contribution de la densité de la source est de 0,6 % ($\pm 0,2 \text{ g.cm}^{-3}$) et celle de la position de la source de 0,3 % ($\pm 1 \text{ mm}$). L'influence des autres paramètres peut être considérée comme négligeable.

3. Conclusion

Le but de cette étude était de réaliser une intercomparaison lors de la détermination de la valeur du kerma dans l'air et le bilan d'incertitudes associé en simulant un irradiateur réaliste de ^{137}Cs . Une approche particulière a été proposée pour le calcul de l'incertitude en étudiant chaque paramètre séparément et en supposant qu'il n'existait pas de corrélation entre ces paramètres. Douze instituts de 10 pays ont participé à cet exercice montrant l'intérêt de cette proposition. Les résultats montrent un bon accord en ce qui concerne la valeur de référence du kerma dans l'air. Par contre, en ce qui concerne l'estimation du bilan d'incertitudes, des

différences significatives ont pu être observées entre participants. Cela est partiellement dû au fait que la variation du kerma est faible pour la plupart des paramètres étudiés. En effet, quand la sensibilité de variation du kerma augmente, les résultats sont en meilleur accord. Les temps de calcul n'étaient parfois pas suffisants pour atteindre le critère fixé de $u_{MC}/\Delta k_{air} < 0,1 \%$. Le bilan d'incertitude est d'environ 0,7 % dont la contribution est majoritairement due à la variation de la masse volumique de la source et la distance de celle-ci. Cette étude montre l'intérêt de réaliser des intercomparaisons dans le domaine du calcul Monte-Carlo, l'un des objectifs était de mettre l'accent sur les difficultés inhérentes à un travail de modélisation afin de montrer qu'un code de calcul n'est pas une « boîte noire », ce qui peut conduire à des résultats erronés ou inexploitable, mais que l'interprétation des résultats est une composante essentielle de la modélisation. Afin de poursuivre ce type d'étude, une nouvelle action d'intercomparasion a été proposée dans le cadre d'EURADOS qui porte sur la simulation de la dose absorbée délivrée par l'accélérateur médical du LNE-LNHB.

***Remerciements.** Les rédacteurs de cet exercice sont H. Vincke (CERN), C. Hranitsky (ARCS, Autriche) et J.-M. Bordy (CEA LIST). Les auteurs remercient les participants pour leur contribution et pour le travail qu'ils ont réalisé.*

RÉFÉRENCES

- BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML (1995) Guide for the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM), ISBN 92-67-10188-9.
- Briesmeister J.F. (2000) MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C. Los Alamos National Laboratory (LANL), Technical Report LA-13709-M, Los Alamos.
- ICRU Report 57 (1998) Conversion Coefficients for use in Radiological Protection Against External Radiation, Bethesda, MD: ICRU Publications.