

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITE AIX-MARSEILLE
pour l'obtention du diplôme

d'Habilitation à Diriger des Recherches

par
Cindy LE LOIREC

Apport de la Simulation Monte Carlo dans les
Systèmes de Management de l'Information des
milieux Nucléaires et Médicaux

Soutenue le 07/12/2021

devant le jury composé de :

Président du jury	José BUSTO	Aix-Marseille Université, Marseille
Rapporteur initial	Loïc DE CARLAN	CEA, Saclay
Rapporteur	Régine GSCHWIND	Université de Franche-Comté, Montbéliard
Rapporteur	Abdel-Mjid NOURREDDINE	Université de Strasbourg
Examineur	Abdallah LYOUSSI	CEA, Cadarache
Examineur	Christelle HUET	IRSN, Fontenay-aux-Roses
Examineur	Igor TSEKHANOVICH	Université de Bordeaux
Tuteur	Christian MOREL	Aix-Marseille Université, Marseille

Remerciements

Il faut allier le pessimisme de la raison à l'optimisme de la volonté.

Antonio Gramsci

Mes premiers remerciements iront à Christian Morel pour avoir accepté de m'accompagner dans ce "retour vers le futur" qu'est la rédaction d'une HDR et également pour ses précieux conseils. Dans un second temps, je souhaiterais remercier les membres du Jury : Loïc De Carlan, pour sa précieuse première relecture en tant que rapporteur principal, Régine Gschwind et Abdel-Mjid Nourreddine pour leur précieux conseils en tant que rapporteurs, Christelle Huet, Abdallah Lyoussi et Igor Tsekhanovich pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux et José Busto pour avoir accepté de présider le jury . Leurs remarques sont précieuses pour la poursuite de mes travaux entre les deux mondes que sont la neutronique et le médical.

Bien que rédiger mon mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches ait été une ambition personnelle que je m'étais fixée au début de ma carrière, sa mise en oeuvre effective au cours de mon changement de thématique en 2017 a fait resurgir les angoisses et les doutes de l'étudiante que j'avais été. Est-ce le bon moment ? Comment faire émerger le fil conducteur de tous ces projets parfois éloignés les uns des autres ? Suis-je en train de céder à une pression "amicale" de mon institution ? Paradoxalement, la période de confinement de 2019-2020 a apporté la réponse à tous ces questionnements et m'a permis de m'investir totalement dans ce projet.

Faire la synthèse de ses travaux de recherche, c'est également l'occasion de renouer concrètement ou virtuellement avec d'anciens collègues. Je tiens ici à saluer l'ancienne équipe du CNDRI de l'INSA de Lyon qui m'a accompagnée en post-doctorat et au sein de laquelle j'ai énormément appris ; l'équipe de physique médicale du CGFL de Dijon qui m'a formée au métier de physicien médical au cours de mon DQPRM ; les anciens collègues du CEA de Saclay et tout particulièrement Mercedes Lopez-Noriega, ma co-bureau pendant quelques mois, Camille Adrien, ma première doctorante, Jean-Marc Bordy, pour ses précieux conseils en métrologie, Josiane Daures pour sa bienveillance et ses talents de pâtissière, Benjamin Rapp et Marc Donois, pour les séances d'irradiation dans le sous-sol de DOSEO ; l'équipe d'imagerie du CHU Henri Mondor pour leur accueil lors de ma mise à disposition ; les physiciens médicaux et médecins avec lesquels j'ai pu collaborer (Guillaume Bonniaud, Serge Dreuil, Lucie Guérin, Bouchra Habib, Laurence Berthelot, David Grevent,...) ; les nouveaux collègues du CEA Cadarache, Yannick Pénéliou, François Barran, Guillaume Truchet, Julien Politello, Bernard Gastaldi sans lesquels je n'aurais pu monter en compétence dans le domaine de la neutronique ; et finalement les étudiants que j'ai encadrés ces dernières années, Ettore Guadagni, Nathan Hernandez, Nicolas Guillevic, Henri Hutinet, Damien Cazenave, qui, je l'espère, garderont tous un bon souvenir de leurs aventures.

Outre les membres du jury et les collègues qui ont jalonné mon parcours professionnel, nombreux sont ceux et celles à avoir contribué à la réussite de ce projet au sein de ma famille. J'ai une pensée toute particulière pour mes parents qui, au travers des valeurs qu'ils m'ont transmises, m'ont permis de persévérer dans la voie que j'avais choisie. Vous continuez à m'accompagner, partout où je suis.

Merci, enfin, à mes enfants, Benjamin et Appoline, et à mon mari, David, pour m'avoir soutenue et surtout supportée pendant ces derniers mois de finalisation.

Résumé

Mes douze premières années dans le domaine de la recherche ont été dédiées au développement de méthodologies numériques permettant l'estimation, la planification et le suivi de la dose au patient en radiothérapie mais également en imagerie médicale. Le but ultime de ces méthodologies est de pouvoir être intégrée dans un système dit de "workflow" permettant aux différents professionnels de santé d'un établissement d'accéder à une vue globale du parcours de soins de chacun des patients en temps réel. Une telle informatisation des services de radiothérapie a nécessité le développement de jumeaux numériques du patient, des machines de traitement mais également du service médical complet.

En 2016, j'ai entrepris un changement de thématique qui m'a amenée à travailler dans le domaine des centrales nucléaires et de la neutronique. Dans ce domaine, les jumeaux numériques font leur apparition dans les phases de conception ou de démantèlement des installations nucléaires. A l'heure actuelle, ce sont surtout les infrastructures qui sont gémélisées. Cependant les développements liés à l'immersion d'opérateurs dans des environnements de réalité virtuelle, voire augmentée, engendrent des besoins de plus en plus pointus dans l'estimation de données physiques en ligne telles que l'activation et la dose. Au cours de ces cinq dernières années, mes travaux de recherche ont été ciblés sur l'estimation de ces données d'intérêt, en particulier pour le cas d'installations en cours de démantèlement.

Bien que ces domaines d'application soient de nature différente, les exigences réglementaires en termes de radioprotection du patient, du personnel et du public font qu'aujourd'hui ils nécessitent des méthodologies de calcul similaires, et font appel, tout particulièrement, à la méthode Monte Carlo. Le fil conducteur de mes travaux de recherche est donc la simulation Monte Carlo et le développement de méthodologies efficaces et rapides d'estimation de données dosimétriques, permettant à plus ou moins long terme un transfert vers les outils numériques de management de l'information utilisés dans le domaine médical (station de planification de la dose en radiothérapie, suivi de la dose au patient en imagerie, ...) et/ou nucléaire.

Table des matières

Remerciements	iii
Resume	v
Table des matières	vi
Table des figures	xi
Liste des tableaux	xiii
Acronymes	xv
Introduction	1
PARTIE I : CONTEXTE DE MES ACTIVITÉS DE R&D	7
1 L'échange de données médico-techniques en médecine	9
1.1 Les réseaux dans l'hôpital	9
1.2 Le parcours du patient en radiothérapie	10
1.2.1 Les standards d'échange en radiothérapie	10
1.2.2 Le workflow en radiothérapie	12
1.2.3 Environnements d'apprentissage modernes pour la radiothérapie	16
1.3 Vers un SIR incorporant la dose en imagerie	17
1.3.1 Prédiction de la dose en imagerie TDM	18
1.3.2 Radioprotection en radiologie interventionnelle	18
1.4 Contributions dans le domaine médical	19
1.4.1 Montage et gestion de projets dans le domaine médical	20
1.4.2 Activités d'encadrement, d'enseignement et d'expertise	24
1.4.3 Activités scientifiques dans le domaine médical	25
2 Les outils numériques du nucléaire	33
2.1 Les briques numériques existantes	34
2.1.1 Outils d'ingénierie numériques	34
2.1.2 La réalité virtuelle	35
2.1.3 La simulation numérique	36
2.2 Plateformes numériques pour le nucléaire	37
2.3 L'apport du numérique dans les activités de démantèlement	39

2.3.1	Evaluation de l'état initial	40
2.3.2	Mise en place d'un scénario	40
2.3.3	Préparation de l'équipe	41
2.3.4	Mise en oeuvre du scénario et des travaux	42
2.3.5	Evaluation, sauvegarde et transfert de l'expérience	42
2.4	Contributions dans le domaine nucléaire	42
2.4.1	Montage et gestion de projets dans le domaine nucléaire	44
2.4.2	Activités d'encadrement, d'enseignement et d'expertise depuis 2016	45
2.4.3	Activités scientifiques dans le domaine nucléaire	45
3	La simulation Monte Carlo pour la médecine et les réacteurs	53
3.1	Modélisation et simulation	54
3.1.1	La simulation	54
3.1.2	Le processus VVQI	56
3.1.3	Les modèles	60
3.2	La Simulation Monte Carlo	61
3.2.1	Modélisation de la géométrie	62
3.2.2	Modélisation de la source	66
3.2.3	Modélisation de la physique	69
3.2.4	Stockage des informations	70
	PARTIE II : AIDE À LA CONCEPTION	73
4	Reconstruction d'image en médecine nucléaire	79
5	L'imagerie de demain au service de la thérapie	97
6	Support à l'analyse FMECA pour la hotte de transfert de ITER	103
	PARTIE III : PRÉDICTION ET SUIVI DE DOSE DANS LE DOMAINE MÉDICAL ET NUCLÉAIRE	113
7	Détermination de données dosimétriques pour la médecine nucléaire	121
8	Outil d'aide à la décision en TDM	131
9	Estimation de l'ambiance dosimétrique d'installations en cours de démantèlement	147
	PARTIE IV : CARACTÉRISATION DU TERME SOURCE DANS LES ACTIVITÉS DE A&D	161
10	Benchmark du formulaire DEMAIN	167
11	Facteurs influençant les niveaux d'activité	177
	Conclusion	191

TABLE DES MATIÈRES

ix

Références Bibliographiques

197

CV

207

Communications

215

Table des figures

1.1	Exemple d'un jumeau numérique de patient généré à partir d'images tomographiques acquises sous un TDM. Les volumes en couleur représentent les volumes tumoraux à traiter ainsi que les organes à risque à protéger. Ils sont contourés par un médecin radiothérapeute.	11
1.2	Parcours du dossier patient dans le cadre d'un soin de radiothérapie externe. Les différentes étapes suivies par le patient et son dossier numérique sont mentionnées : acquisition des images anatomiques, Simulation Virtuelle, Planification de la dose avec le TPS et traitement sous le LINAC. Les différents objets du DICOM-RT sont également mentionnés ainsi que les collaborations entre les différentes spécialités médicales (médecin, manipulateur de radiologie, physicien médical).	14
1.3	L'environnement VERT peut être utilisé pour la formation des étudiants en médecine et/ou radiophysique.	17
1.4	Parcours complet (du diagnostic au traitement) du dossier patient dans le cadre d'un soin de radiothérapie externe. Les différentes étapes suivies par le patient et son dossier numérique sont mentionnées ainsi que les développements apportés à chaque étape par mes travaux réalisés en post-doctorat à l'INSA de Lyon et au CEA en tant qu'ingénieur de recherche sur la plateforme DOSEO.	20
1.5	Champ modulé obtenu avec PENSSART pour un champ modulé de prostate.	28
1.6	Distribution de dose obtenue dans une cuve à eau pour le champ modulé (gauche) et profil de dose obtenu le long de l'axe x (à droite).	28
1.7	Configuration typique pour l'évaluation d'une procédure en cardiologie avec l'outil em.SIM	30
1.8	Carte de dose à la peau, dose pic à la peau et séquence d'images associée	31
2.1	Schéma de calcul en 2 étapes utilisé pour la gestion du combustible dans un réacteur à eau légère.	37
2.2	Étapes majeures de la vie d'un réacteur. L'étape de démantèlement est détaillée : sont mis en avant les aspects réglementaires ainsi que les étapes plus fonctionnelles liées aux activités du démantèlement.	44
2.3	Configuration du bunker (a), sous-sources du modèle de sources virtuelles (MSV) (b) et histogrammes pour la sous-source 7 correspondant à l'écran (c)	49
2.4	Représentation 2D de a) l'estimateur de trace linéaire (TLE), et b) l'estimateur exponentiel de trace (e-TLE)	50
3.1	Composants d'une simulation.	54

3.2	Eléments d'une simulation en radiothérapie (a) et dans le cadre du démantèlement d'un réacteur (b).	55
3.3	Contenu d'un formulaire de calcul dans le domaine de la physique des réacteurs et du cycle et déclinaison du processus de VVQI associé	58
3.4	Incertitudes géométriques observées en radiothérapie	60
3.5	Incertitudes sur la dose en radiothérapie	60
3.6	Incertitudes souhaitables en radiothérapie	61
3.7	Evolution de l'état d'un système déterministe (à gauche) ou stochastique (à droite)	61
3.8	Fantôme MIRD-5	63
3.9	Procédure pour créer un fantôme de voxel en utilisant, à titre d'exemple, le jeu de données d'images du cadavre VIP-man	63
3.10	Avantages et inconvénients des types de géométrie utilisés pour modéliser le patient ou le détecteur en médecine	64
3.11	Algorithme de Turner utilisé pour obtenir la filtration inhérente équivalente d'un TDM	67
3.12	Algorithme de Turner utilisé pour obtenir la filtration équivalente à celle du filtre papillon d'un TDM	67
3.13	Décomposition de la dose et exemple de distributions obtenues pour deux sources d'un modèle de sources virtuelles pour un LINAC	68
3.14	Exemple de conversion de fichier CAO en géométrie utilisable par les codes MC	69
4.1	Le positon se déplace en 3D avec un parcours r correspondant à la distance jusqu'au point d'annihilation. Les scanners TEP (classiques et TOF) ne mesurent pas le lieu d'annihilation mais la position de la ligne (LOR) définie par les photons détectés. Le déplacement δ de la LOR est la quantité directement associée à la donnée mesurée.	81
8.1	Interface de l'outil d'optimisation proposé par Camille Adrien dans le cadre de son doctorat.	132
9.1	Représentation schématique et mathématique des différents estimateurs	149

Liste des tableaux

1.1 Montage de projets et de Propositions Techniques et Financières au CEA LIST. . . .	23
6.1 Observables et échelles spatiales mises en oeuvre dans le cadre des études présentées dans ce chapitre.	116

Acronymes

AAPM American Association of Physicists in Medicine

AHARA As High As Reasonably Achievable

ALARA As Low As Reasonably Achievable

ANR Agence Nationale de la Recherche

ANSM Agence Nationale de Sécurité du Médicament

ASN Autorité de Sûreté Nucléaire

ASTRE Action de Soutien à la Technologie et à la Recherche en Essonne

BIM Building Information Modeling

BTP Bâtiment et Travaux Publics

CAMARI Certificat d’Aptitude à Manipuler les Appareils de Radiologie Industrielle

CAO Conception Assistée par Ordinateur

CDD Contrat à Durée Déterminée

CDR Critical Design Review

CI Carte d’Importance

CND Contrôle Non Destructif

CQ Contrôle Qualité

CTDI Computed Tomography Dose Index

CTV Clinical Tumor Volume - volume cible anatomo-clinique, extensions microscopiques de la tumeur

DACS Dose Archiving and Communication System

DAM Digital Asset Management

DED Débit d’Equivalent de Dose

DICOM Digital Imaging and Communications in Medicine

DQPRM Diplôme de Qualification en Physique Radiologique et Médicale

DRR Digital Reconstructed Radiography

EBR Efficacité Biologique Relative

EDF Electricité de France

EPID Electronic Portal Imaging Device

EPOTRAN Electron and POSitron TRANsport

FBP Filtered Back Projection

- FDG** Fluorodésoxyglucose
- FDR** Final Design Review
- FOV** Field-Of-View
- GE** General Electric
- GNP** Gold NanoParticles
- GPU** Graphics Processing Unit
- HDV** Histogramme Dose Volume
- ICRS** International Conference on Radiation Shielding
- INSTN** Institut National des Sciences et Techniques du Nucléaire
- IoT** Internet of Tools
- IRM** Imagerie par Résonance Magnétique
- IRSN** Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire
- ITER** International Thermonuclear Experimental Reactor ou réacteur thermonucléaire expérimental international
- LINAC** Linear Accelerator
- LM2S** CEA LIST, Laboratoire Modélisation, Systèmes et Simulation
- LOR** Line Of Response
- LPMC** Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions
- MIRD** Medical Internal Radiation Dose
- MC** Monte Carlo
- MLC** Multi Leaf Collimator
- MSV** Modèle de Source Virtuelle
- NASA** National Aeronautics and Space Administration
- OAR** Organe A Risque
- OCS** Outil de Calcul Scientifique permettant la simulation numérique de phénomènes physiques ; ils sont composés d'un ou plusieurs solveurs et éventuellement de pré- et post-processeurs
- OSEM** Ordered Subset Expectation Maximization
- OSL** Optically Stimulated Luminescence
- PACS** Picture Archiving and Communication System
- PDL** Produit Dose Longueur
- PDR** Preliminary Design Review
- PKI** Point Kernel Integration
- PLM** Product Lifecycle Management
- PSF** Point Spread Function
- PSFmc** Phase Space File
- PTV** Planning Tumor Volume - obtenu par l'addition d'une marge autour du CTV, il comprend :
(i) l'ITV : Internal Target Volume, prise en considération du mouvement des organes et (ii) le SM : Set-up Margin, incertitude de repositionnement à chaque séance de radiothérapie
- QI** Qualité Image

QUAS Quality Archiving System
RCMI Radiothérapie Conformationnelle avec Modulation de l'Intensité
RT Radiothérapie
R&V Record and Verify
RDSR Radiation Dose Structured Report
RV Réalité Augmentée
SIH Système d'Informations Hospitalier
SIR Système d'Informations de Radiologie
SIRT Système d'Informations de RadioThérapie
SMC Simulation Monte Carlo
SSA Site Support Agreement
SSDE Size Specific Dose Estimate
SUV Standardized Uptake Value
TDM Tomodensitométrie
TEP Tomographie par Emission de Positons
TEP-FDG TEP au fluorodesoxyglucose marqué au ^{18}F
TEP/IRM système d'imagerie hybride combinant la TEP et l'IRM
TOF Time Of Flight
TPS Treatment Planning System
UE Union Européenne
VC Volume Cible
VMAT Volumetric Modulated Arc Therapy
VRT Variance Reduction Technique
VVQI Validation - Vérification - Quantification des Incertitudes
XFCT X-ray Fluorescence Computed Tomography

Introduction

Lors du lancement d'Apollo 13, un matin d'avril 1970, personne n'avait prédit que les astronautes James Lovell, John Swigert et Fred Haise se battraient bientôt pour leur survie, l'un de leurs réservoirs à oxygène ayant explosé deux jours après le début de la mission, ni que la phrase désormais célèbre de Swigert - "Houston, nous avons eu un problème ici" - déclencherait une fébrile opération de sauvetage pour ramener les astronautes à la maison en toute sécurité. Alors que le monde retenait son souffle, l'équipe de contrôle de vol de la NASA ¹ à Houston a relevé son plus grand défi à ce jour.

Comment résoudre les dysfonctionnements techniques à 200 000 kilomètres ?

La clé de l'opération de sauvetage fut que la NASA avait conservé sur la Terre un système miroir d'Apollo 13 - un modèle physique du véhicule spatial et de ses composants. Cela a permis aux ingénieurs sur Terre de modéliser et de tester des solutions possibles, en simulant les conditions à bord d'Apollo 13. Lorsque la quantité de dioxyde de carbone contenue dans le module lunaire d'Apollo 13 a atteint un niveau critique, les ingénieurs de la NASA ont créé un purificateur d'air improvisé et ont expliqué aux astronautes comment le construire à l'aide des matériaux disponibles dans le vaisseau spatial [1].

Depuis 1970, la technologie a bien évolué. Les modèles analogiques ont été remplacés par des modèles numériques pour suivre les missions spatiales et comprendre comment diagnostiquer et corriger à distance les défauts d'une machine. Cependant, la notion sous-jacente reste la même : un modèle d'un objet physique - un *jumeau* - permet d'identifier des problèmes, de comprendre le fonctionnement d'un ensemble complexe sans même se déplacer. L'analyse des données recueillies en temps réels depuis des capteurs fournit des informations supplémentaires en sus d'une représentation numérique de câblages, de systèmes embarqués et d'un modèle 3D de l'objet. Maintenance préventive et prédictive, surveillance, simulation, visualisation, aide à la conception. Les possibilités sont nombreuses :

- Dans le domaine de l'aviation par exemple, la conception, la fabrication et la maintenance des avions coûtent très cher. Les fabricants et les exploitants veulent pouvoir réduire la facture en obtenant des informations cruciales qui leur indiquera à l'avance quand intervenir sur un appareil, quelles pièces à changer et à quel moment. Celui dont les services sont les plus développés dans le secteur n'est autre que General Electric Aviation. Le fabricant propose ses derniers moteurs d'avion sous un modèle *as a service*. Il ne vend pas les moteurs aux compagnies aériennes mais les louent en complément de services de maintenance prédictive des engins et de moyens d'optimisation des temps d'occupation des avions au sol. Les données

1. National Aeronautics and Space Administration

sont analysées en temps réel grâce au *machine learning* et sont rendues visibles depuis un tableau de bord sur lequel sont représentés, en 2D ou en 3D, les moteurs.

- Dans le domaine du BTP², le jumeau numérique facilite la gestion des bâtiments connectés. Les architectes et les chefs de chantier travaillent encore beaucoup sur papier. Pourtant, les solutions numériques existent, notamment la méthode BIM³. Il s'agit d'associer les plans d'architecte, les informations sur les matériaux utilisés, le planning de construction, les budgets et les données en provenance des systèmes énergétiques et les capteurs IoT⁴ placés dans les bâtiments. Bref, un jumeau numérique complet. Il ne s'agit pas seulement de réaliser des simulations avant la construction, mais surtout d'optimiser la gestion des immeubles, des bureaux tout au long de leur durée de vie. Consommation d'énergie, sécurité, accident, maintenance prédictive du système de ventilation ou des ascenseurs, etc. Beaucoup d'éléments peuvent être intégrés dans un jumeau numérique d'un bâtiment. C'est typiquement ce qu'entreprend Siemens en mettant à disposition des entreprises du BTP et des gestionnaires de maintenance près de 2000 jeux de données correspondant chacun à un produit en particulier. Parmi ceux-là, des systèmes de chaufferie connectée, des composants électriques, des lampes connectées, etc.
- Avec l'industrie 4.0 ou usine connectée, le secteur entre dans sa quatrième révolution (la première au XVIII^e siècle avec la production mécanique, la seconde à la fin du XVIII^e siècle avec la production de masse et la troisième au milieu du XX^e siècle avec la production automatisée) caractérisée par une fusion entre Internet et les usines. L'aviation est sûrement le secteur le plus avancé dans ce domaine. La visualisation des données en temps réel devient primordiale afin de faciliter la maintenance et d'optimiser la production. Ainsi, Altran expérimente avec Airbus une solution de visualisation des données en réalité virtuelle reposant sur la plateforme IoT VueForge.
- La production d'énergie peut aussi bénéficier de cette technique. Là encore, la simulation revêt un rôle important puisqu'il s'agit de gérer des sites industriels où la sécurité est essentielle. En testant en amont les organes de sécurité, les structures, les différents composants électroniques, ..., il est ainsi possible de prévoir le type d'incidents qui peut se déclarer, de prévoir les interventions et de mieux gérer un événement en situation réelle. Les grands acteurs du secteur énergétique ont très vite compris l'intérêt de connecter leurs infrastructures et de visualiser les données de leurs installations. C'est ce qu'EDF⁵ a décidé de planifier en 2013. Dans ce cadre, il s'agit de surveiller et gérer la production d'énergie des centrales nucléaires réparties sur tout le territoire français. Pour cela, l'entreprise a commencé par réaliser des jumeaux numériques des différents réacteurs nucléaires. Au-delà d'un enjeu de production et de sûreté, il s'agit également de renforcer la cybersécurité des installations en représentant les éventuelles attaques *via* le jumeau numérique. Pour une centrale nucléaire, un jumeau aide à la maintenance et à la préparation des travaux à effectuer lors d'une interruption de fonctionnement. La simulation réalisée par EDF concerne d'abord le générateur de vapeur, pour les opérations d'entretien, et l'enceinte en béton du

2. Bâtiment et Travaux Publics

3. Building Information Modeling

4. Internet of Things

5. Electricité de France

réacteur, pour en anticiper le vieillissement. Mais ce n'est pas simple. Les formules mathématiques décrivant les phénomènes physiques ne suffisent pas pour reproduire convenablement des installations aussi complexes. Il faut aussi exploiter les retours d'expérience. Le modèle est donc nourri avec les données recueillies sur l'ensemble du parc nucléaire français.

Les maquettes 3D permettent de compléter le jumeau numérique. Elles sont réalisées à l'aide de scans-laser et de photographies et elles permettent à toutes les équipes impliquées lors d'une interruption de préparer leurs interventions, souvent effectuées dans des endroits difficiles d'accès, voire interdits, durant le fonctionnement.

Le premier jumeau numérique de ce genre chez EDF est le réacteur de 1300 MW de Saint-Alban-du-Rhône (Isère). Comme dans d'autres domaines industriels, un « jumeau numérique » est un ensemble d'algorithmes réalisant une simulation fonctionnelle d'une installation. Il faut donc reproduire par le calcul les processus physiques qui sont à l'oeuvre. Une fois ce travail réalisé, cette version virtuelle peut être utilisée de différentes manières, notamment pour la formation et pour l'entraînement. Comme dans un simulateur de vol, une équipe de pilotage est exposée à des dysfonctionnements multiples et variés, et ses actions ont les conséquences correspondant à celles de la réalité.

- Dans le domaine de la santé, c'est encore un terrain en friche qu'une multitude de start-ups et laboratoires impatients ont commencé à investir. Dans ce domaine, les atouts physiques des jumeaux numériques peuvent être les appareils, les patients, les systèmes de prestation de soins de santé, la circulation de l'information dans les dossiers de santé ou tout autre aspect des soins prodigués aux patients. Dans chaque cas, le but du jumeau numérique est de gagner en rapidité, fiabilité et de fournir au patient une prestation de soins de santé plus efficace.

- Les annulations d'examens et les perturbations imprévues du flux de travail sont des problèmes critiques pour les hôpitaux et les patients. L'équipement d'imagerie doit être prêt et opérationnel en cas de besoin. Les défaillances du système peuvent entraîner des temps d'arrêt imprévus, coûteux et alourdissant les temps d'attente et l'inconfort des patients, avec un impact potentiellement négatif sur les résultats cliniques. Il est toutefois impossible d'éliminer le besoin de maintenance corrective voire curative. Par exemple, certains composants d'un scanner IRM⁶ se dégradent avec le temps en raison d'une utilisation régulière. Une maintenance corrective est nécessaire pour réparer les pièces détériorées. Le problème est que de tels événements sont aléatoires. Le défi consiste donc à identifier les problèmes potentiels avant qu'ils ne surviennent, afin de pouvoir planifier la maintenance, on parle alors de maintenance préventive, à un moment où l'équipement n'est pas utilisé (par exemple, la nuit).

C'est là que le concept du jumeau numérique entre en jeu.

Chaque jour, un scanner IRM typique produit en moyenne 800000 messages reflétant le fonctionnement technique du système. Grâce à ce qui est appelé des "services de surveillance à distance proactifs", il est possible de suivre et d'analyser ces messages de journalisation afin de détecter tout signe précurseur de problèmes techniques imminents - en suivant la même philosophie que celle utilisée par la NASA pour surveiller l'état de ses véhicules spatiaux.⁷

La surveillance à distance proactive permet aux constructeurs (qui gèrent la maintenance

6. Imagerie par Résonance Magnétique

7. Ces analyses sont effectuées uniquement sur des données techniques, obtenues en accord avec les clients; pas sur les données cliniques qu'un hôpital collecte avec le scanner.

des appareils vendus) d'identifier et de résoudre les problèmes imminents de loin et de planifier la maintenance par un opérateur spécialisé si nécessaire *ie* si le problème ne peut être réglé à distance. Étant donné que les données du système sont analysées en temps réel à l'avance, l'ingénieur sait exactement quel type de maintenance est nécessaire et quel composant de rechange apporter à l'hôpital. La maintenance préventive peut sembler contre-intuitive de prime abord. Pourquoi réparer ce qui n'est pas encore défaillant ? La continuité des soins étant vitale pour les prestataires de soins de santé et les patients, il est très utile de pouvoir identifier les problèmes techniques potentiels des systèmes et des dispositifs médicaux et de les résoudre avant qu'ils ne surviennent.

- La simulation d'un patient sur ordinateur pourrait bien constituer la prochaine révolution médicale. Et si l'on testait un médicament ou une prothèse sur un patient virtuel, plutôt que sur un être humain ? Non plus *in vivo* (sur des êtres vivants), mais *in silico* au moyen de modèles informatiques ?

Des jumeaux numériques anatomiques de patients sont d'ores et déjà utilisés dans le domaine médical, et tout particulièrement dans le domaine de la radiothérapie, afin de cibler et de conformer le traitement à la zone tumorale. Le jumeau numérique envisagé par Siemens irait au-delà d'une telle modélisation purement anatomique pour simuler la fonctionnalité d'un organe, tel que le cœur. Et cela ne concerne pas que le cœur. Des algorithmes intelligents pourraient «apprendre» le fonctionnement de pratiquement tous les organes du corps, éventuellement en extrayant des données d'images de patients et du dossier médical électronique. Une simulation numérique du patient dans son ensemble pourrait permettre de prédire des maladies dans les semaines ou les mois à venir. Ainsi, le jumeau numérique d'un patient pourrait également être utilisé pour prédire la réponse du patient à différents traitements. Les représentations numériques d'un patient dans son ensemble nécessiteraient la collecte et l'interprétation de données à une échelle sans précédent, nécessitant non seulement des informations fonctionnelles, mais également des informations cellulaires et génomiques. Siemens n'est pas seul dans la recherche et le développement d'un jumeau numérique. GE⁸ et Philips sont tous deux connus pour développer des numérisations similaires.

Nous l'avons vu le développement de jumeaux numériques fait partie intégrante des développements en cours dans de nombreux domaines. Nous allons nous intéresser ici aux cas particuliers des domaines utilisant des rayonnements ionisants : la médecine (imagerie X, imagerie nucléaire et radiothérapie) et la production nucléaire d'énergie avec un focus sur les activités de démantèlement. Au cours de mes activités de R&D dans ces deux domaines, j'y ai rencontré le jumeau numérique sous des formes assez proches.

Mes douze premières années dans le domaine de la recherche ont en effet été dédiées au développement de méthodologies numériques permettant l'estimation, la planification et le suivi de la dose au patient en radiothérapie mais également en imagerie médicale. Le but ultime de ces méthodologies est de pouvoir être intégrée dans un système dit de "workflow" permettant aux différents professionnels de santé d'un établissement d'accéder à une vue globale du parcours de soins de chacun des patients en temps réel. Une telle informatisation des services de radiothérapie a nécessité le

8. General Electric

développement de jumeaux numériques du patient, des machines de traitement mais également du service médical complet. Ces éléments sont décrits dans le premier chapitre de la partie I. J'y présente, en particulier, les systèmes de workflow mis en place dans le domaine médical. Je consacre également une partie aux contributions auxquelles j'ai participées dans cette thématique sous différents aspects (scientifique, projet, encadrement, enseignement, expertise) afin de mettre en avant, non seulement les développements mis en oeuvre au cours de mes activités, mais également mon implication dans la recherche de financements pour accompagner ces développements ainsi que mon engagement dans le "transfert des connaissances" que je trouve intimement lié à toute activité de R&D.

En 2016, j'ai entrepris un changement de thématique qui m'a amenée à travailler dans le domaine des centrales nucléaires et de la neutronique. Dans ce domaine, les jumeaux numériques font leur apparition dans les phases de conception ou de démantèlement des installations nucléaires. A l'heure actuelle, ce sont surtout les infrastructures qui sont gémélisées. Cependant les développements liés à l'immersion d'opérateurs dans des environnements de réalité virtuelle, voire augmentée, engendrent des besoins de plus en plus pointus dans l'estimation de données physiques en ligne telles que l'activation et la dose. Au cours de ces cinq dernières années, mes travaux de recherche ont été ciblés sur l'estimation de ces données d'intérêt, en particulier pour le cas d'installations en cours de démantèlement. Le contexte dans lequel je travaille actuellement ainsi que les activités que j'ai menées dernièrement sont décrits dans le chapitre 2 de la partie I. J'y présente également mes différentes contributions dans cette nouvelle activité depuis 2016.

Bien que ces domaines d'application soient de nature différente, les exigences réglementaires en termes de radioprotection du patient, du personnel et du public font qu'aujourd'hui ils nécessitent des méthodologies de calcul similaires, et font appel, tout particulièrement, à la méthode Monte Carlo. Le fil conducteur de mes travaux de recherche est donc la simulation Monte Carlo et le développement de méthodologies efficaces et rapides d'estimation de données dosimétriques, permettant à plus ou moins long terme un transfert vers les outils numériques de management de l'information utilisés dans le domaine médical (station de planification de la dose en radiothérapie, suivi de la dose au patient en imagerie, ...) et/ou nucléaire. J'ai décrit dans le chapitre 3 de la partie I les principes généraux de la simulation Monte Carlo ainsi que ses spécificités dans le domaine médical et nucléaire.

La suite du document est consacrée à la description des travaux les plus pertinents que j'ai réalisés depuis mon doctorat. Pour cela, j'ai inséré certains de mes articles publiés dans différentes revues, que j'ai accompagné d'une introduction explicative sur le contexte dans lequel les travaux ont été menés. De plus, afin de mettre en évidence la transversalité de la simulation Monte Carlo et des méthodes développées au cours de mon parcours, j'ai organisé ces travaux selon trois grandes thématiques regroupées dans 3 grandes parties :

- Partie II : Aide à la conception dans les domaines de la fusion et de l'imagerie médicale.
- Partie III : Prédiction et suivi de données dosimétriques dans le domaine médical et nucléaire.
- Partie IV : Caractérisation du terme source dans les activités d'assainissement-démantèlement.

La conclusion est dédiée à la présentation de mon projet de recherche et à la poursuite de mes activités dans les années à venir.

PARTIE I

CONTEXTE DE MES ACTIVITÉS DE R&D

Chapitre 1

L'échange de données médico-techniques en médecine

Les applications médicales des rayonnements ionisants occupent une place importante dans le domaine des soins [2] :

- la radiothérapie est une méthode essentielle du traitement des cancers, elle concerne environ 50% des patients porteurs de cancer avec un taux de guérison de 80% ;
- le recours à une imagerie médicale de plus en plus performante, en scanographie (TDM¹) notamment, améliore la qualité du diagnostic et permet de mieux orienter la stratégie thérapeutique et d'évaluer l'efficacité des traitements ;
- avec les actes dits interventionnels, l'imagerie permet également d'accomplir des gestes thérapeutiques précis (en chirurgie par exemple).

La manière de diagnostiquer les pathologies et de délivrer les traitements devient aujourd'hui de plus en plus complexe avec une quantité d'informations partagées en augmentation (données patients et données machines). Ces données sont aujourd'hui transférées *via* plusieurs réseaux hospitaliers dédiés (présentés succinctement par la suite). La qualité des soins dépend de la disponibilité et de la précision de ces informations et donc de l'efficacité des réseaux hospitaliers.

1.1 Les réseaux dans l'hôpital

Les liens *via* des réseaux sont devenus possibles grâce à la définition de standards de recommandations et de normes au niveau international et de leur généralisation progressive. Trois systèmes d'informations sont rencontrés dans le milieu hospitalier :

- Le SIH² gère les aspects administratifs et a un lien fort avec les services médicaux-techniques (imagerie et radiothérapie). Il comprend : la récolte des indices nécessaires à la qualification de l'activité, la cotation des actes, des données statistiques, l'archivage des informations (suivi du patient, dossier médical), des outils bureautiques.

1. Tomodensitométrie

2. Système d'Informations Hospitalier

- Le SIR^{3 4} permet un meilleur traitement de l'information radiologique. Il permet l'utilisation de l'image sous forme numérique et rend en particulier possible la fusion d'images entre différentes modalités. Il permet le partage de l'information entre différents utilisateurs et l'archivage sans perte d'information à l'aide du PACS⁵.
- Le SIRT⁶ fournit à chaque étape de l'organisation et de la mise en oeuvre d'un soin de radiothérapie, l'ensemble des informations nécessaires à la bonne exécution de chaque fonction et à leur suivi. Les différents objectifs du SIRT sont :
 1. la gestion de la dose délivrée au patient jusqu'au compte-rendu final de traitement ;
 2. le transfert automatique d'un nombre de paramètres actuellement en augmentation du fait de l'accroissement de la complexité des machines de traitement et donc des paramètres associés ;
 3. l'accès à des images de modalités différentes permettant une amélioration de la définition du volume tumoral et donc de la dose prévisionnelle et délivrée ;
 4. la prise en charge du contrôle et de la gestion de l'ensemble des paramètres intervenant dans le déroulement des traitements : renseignements administratifs, cliniques, thérapeutiques et techniques (fonction "Record and Verify" R&V⁷ du SIRT).

Le SIRT associé au PACS et aujourd'hui au DACS⁸ voire au QUAS⁹ représente le site de l'enregistrement complet des données techniques associées au dossier médical.

1.2 Le parcours du patient en radiothérapie

Des reconstructions virtuelles de patients basées sur des images TDM, IRM ou TEP¹⁰ sont déjà utilisées de nos jours. Ces jumeaux numériques sont plutôt anatomiques mais peuvent également être dotés de paramètres indiquant l'activité des organes grâce aux données fournies par l'imagerie fonctionnelle (IRM ou TEP le plus souvent). Ils sont utilisés en chirurgie *via* le biais de la radiologie interventionnelle par exemple, au cours de laquelle des images de l'anatomie du patient sont prises lors de l'opération afin de guider le praticien dans ses gestes. Ce qui est peut-être moins connu du public non averti c'est que ces jumeaux numériques sont utilisés également en radiothérapie (voir figure 1.1) pour planifier les traitements, c'est-à-dire, pour planifier de façon prédictive la dose optimale à délivrer à la tumeur tout en protégeant au mieux les tissus sains. Les jumeaux numériques utilisés peuvent parfois être "dynamiques" pour prendre en compte le mouvement des organes (et en particulier du coeur) au cours du traitement. La délivrance du faisceau de radiothérapie est alors monitorée par le cycle cardiaque afin de limiter l'irradiation de cet organe sensible.

1.2.1 Les standards d'échange en radiothérapie

La radiothérapie est une modalité de traitement basée sur l'imagerie. Elle consiste à irradier la zone tumorale en préservant au mieux les tissus sains, à l'aide d'une balistique de traitement et

3. Système d'Informations de Radiologie
 4. Système d'Informations de Radiologie
 5. Picture Archiving and Communication System
 6. Système d'Informations de RadioThérapie
 7. Record and Verify
 8. Dose Archiving and Communication System
 9. Quality Archiving System
 10. Tomographie par Emission de Positons



FIGURE 1.1 – Exemple d'un jumeau numérique de patient généré à partir d'images tomographiques acquises sous un TDM. Les volumes en couleur représentent les volumes tumoraux à traiter ainsi que les organes à risque à protéger. Ils sont contourés par un médecin radiothérapeute.

d'une fluence de particules basées sur les images tomographiques du patient. Elle nécessite donc des images TDM, IRM ou TEP fournissant les données anatomiques du patient et de la tumeur (forme et densité) voire des données fonctionnelles sur la zone tumorale, ainsi qu'un accélérateur linéaire de particules (LINAC¹¹) afin de délivrer le traitement. Ces LINACs sont aujourd'hui pourvus de modalités d'imagerie pour localiser la tumeur et vérifier le plan de traitement. La délivrance du traitement en radiothérapie est un processus complexe nécessitant de nombreuses informations :

- des données patient pour planifier le plan de traitement,
- des images pour identifier les régions d'intérêt et des marqueurs pour aligner les images,
- des techniques de fusion d'images pour délimiter les structures pathologiques à partir de différentes modalités,
- des algorithmes de calcul de dose pour assurer la délivrance d'une dose élevée à la tumeur tout en évitant les organes à risque.

Dans les différentes étapes de ce processus, les technologies informatiques d'imagerie sont utilisées de façon extensive et en particulier le PACS. Le PACS est un système de gestion des images qui combine les modalités d'imagerie et les systèmes d'informations des patients. Il intègre au sein d'un réseau hospitalier les images de toutes les modalités, les archive dans une base de données et les distribue de façon sélective aux stations de travail qui en ont besoin. Bien que le PACS ait d'abord été développé dans un but diagnostique, il est aujourd'hui connecté au serveur de RT¹² (figure 1.2). Le PACS utilise un format standardisé pour les images (DICOM¹³) et un standard spécifique pour les informations textuelles (HL-7) [3].

Le DICOM est le format standard d'échange en imagerie. Etant donné que le processus de radiothérapie utilise de nombreuses images, il a semblé intéressant d'utiliser ce protocole d'échange pour partager des informations. Un protocole DICOM dédié à la RT (appelé DICOM-RT) a alors été développé. Cet autre protocole d'échange présente de nombreux avantages :

11. Linear Accelerator
 12. Radiothérapie
 13. Digital Imaging and Communications in Medicine

- les informations peuvent être échangées entre les machines, quelque soit les vendeurs,
- le workflow du traitement peut être contrôlé et analysé de façon fine ce qui conduit à une meilleure qualité des traitements délivrés au patient,
- c'est un premier pas vers le dossier patient informatisé puisque toutes les informations relatives à un patient sont facilement accessibles.

Le DICOM-RT est donc une extension du DICOM au domaine de la RT du fait de l'accroissement des échanges de données et d'images dans les domaines de la planification, de la délivrance et de la vérification de la dose délivrée. Il regroupe 7 objets :

- RTImage : DRR ¹⁴ ;
- RTDose : distribution de dose calculée par TPS ^{15 16} ;
- RTStructure : structures anatomiques liées au patient ;
- RTPlan : géométrie de l'irradiation, traitement délivré, données dosimétriques spécifiques au déroulement du soin par RT ;
- RT Treatment Record : sessions de traitement enregistrées.

Le scénario minimum d'échanges est le suivant :

1. Initialisation du dossier patient sur le SIRT : lien avec le SIH.
2. Les RTImage et RTPlan produits par le TPS sont poussés vers le R&V et le système d'imagerie embarquée.
3. Le SIRT communique le RTPlan au LINAC qui le sauvegarde.
4. L'image portale réalisée en début de séance est comparée à l'image de référence produite par le TPS (DRR).

La transmission des données se fait de manière automatique et remplace les transferts papier. De plus, la consistance des données est vérifiée lors du transfert ce qui conduit à plus de sécurité.

1.2.2 Le workflow en radiothérapie

Le workflow en RT est là pour assurer la qualité des traitements et en particulier la prescription de la dose. Les TPS permettent de simuler la dose délivrée au patient à l'aide de 2 jumeaux numériques : celui du patient et celui de la machine. Le physicien médical est là pour s'assurer que la dose délivrée est bien la dose prescrite. Pour cela, il doit réaliser plusieurs CQ ¹⁷ sur les machines mais également sur le réseau dédié.

Du point de vue R&D, les recherches se portent principalement sur les algorithmes de dose et sur la modélisation la plus précise possible de la machine et du patient, avec plus récemment, un focus sur la prise en compte des effets dynamiques, que ce soit "mouvement de la machine" ou "mouvement des organes du patient". Des recherches sont également en cours pour compléter le jumeau anatomique du patient par des données biologiques, prenant en compte la radiosensibilité des organes et

14. Digital Reconstructed Radiography

15. Treatment Planning System

16. Treatment Planning System

17. Contrôle Qualité

les utilisant pour optimiser les plans de traitement.

Une fois le diagnostic posé et le traitement par RT choisi, le patient et son jumeau numérique suivent un parcours bien spécifique (voir figure 1.2 basée sur [3, 4, 5, 6]) :

- Acquisition des données anatomiques et génération du jumeau numérique du patient
Les images sont acquises sur un TDM spécifique (dit de Simulation Virtuelle) permettant l'acquisition de données anatomiques mais également le repérage de données anatomiques ou additionnels (marques sur la peau, implants) pour un repositionnement correct du patient lors des séances de traitement. Les données sont ensuite transférées vers le TPS.
- Segmentation des volumes cibles (VC¹⁸) et des organes à risque (OAR¹⁹)
Sur chaque "tranche" (ou image tomographique) du patient, le médecin contourne le VC (soit la zone tumorale à laquelle des marges sont appliquées) ainsi que les OAR, organes sensibles qui doivent être protégés et auxquels une limite de dose sera appliquée. Ce contournage permet de définir l'objet RTStructure.
- Mise en place des faisceaux
Les faisceaux sont orientés de façon optimale à l'aide de protocoles pré-définis ou à l'aide d'un outil d'optimisation pour les plans dynamiques. Le collimateur multi-lames (MLC²⁰), composé de plusieurs fines lames de tungstène, est, quant à lui, utilisé pour que le champ se conforme au mieux à la forme de la tumeur, pour chacune des orientations du faisceau.
- Calcul de la dose
Le calcul de dose est réalisé une fois les faisceaux positionnés pour les plans "classiques". Pour les plans dynamiques (type RCMI²¹ ou arcthérapie (VMAT²²)) le calcul de dose et la position des lames sont optimisés en même temps à l'aide d'une planification inverse utilisant des fonctions objectifs pour la dose aux VC et des contraintes pour la dose aux OAR. Pour cela un algorithme simplifié et plus rapide du calcul de dose est utilisé. Une fois la position des lames déterminée pour chaque orientation du faisceau, un nouveau calcul de dose plus précis est réalisé pour vérifier que les objectifs et contraintes de dose sont bien respectées.
- Evaluation du plan de traitement
Pour évaluer le plan de traitement, des histogrammes dose volume (HDV²³) permettent l'extraction de données statistiques (dose minimale, maximale, moyenne, modale), voire pour certains TPS l'extraction d'indices biologiques.
- Mise en oeuvre du plan de traitement
Le plan de traitement est transféré vers l'appareil de traitement : export du RTplan.

Ce parcours est schématisé sur la figure 1.2 par différentes "routes" suivies par le dossier patient.

18. Volume Cible

19. Organe A Risque

20. Multi Leaf Collimator

21. Radiothérapie Conformationnelle avec Modulation de l'Intensité

22. Volumetric Modulated Arc Therapy

23. Histogramme Dose Volume

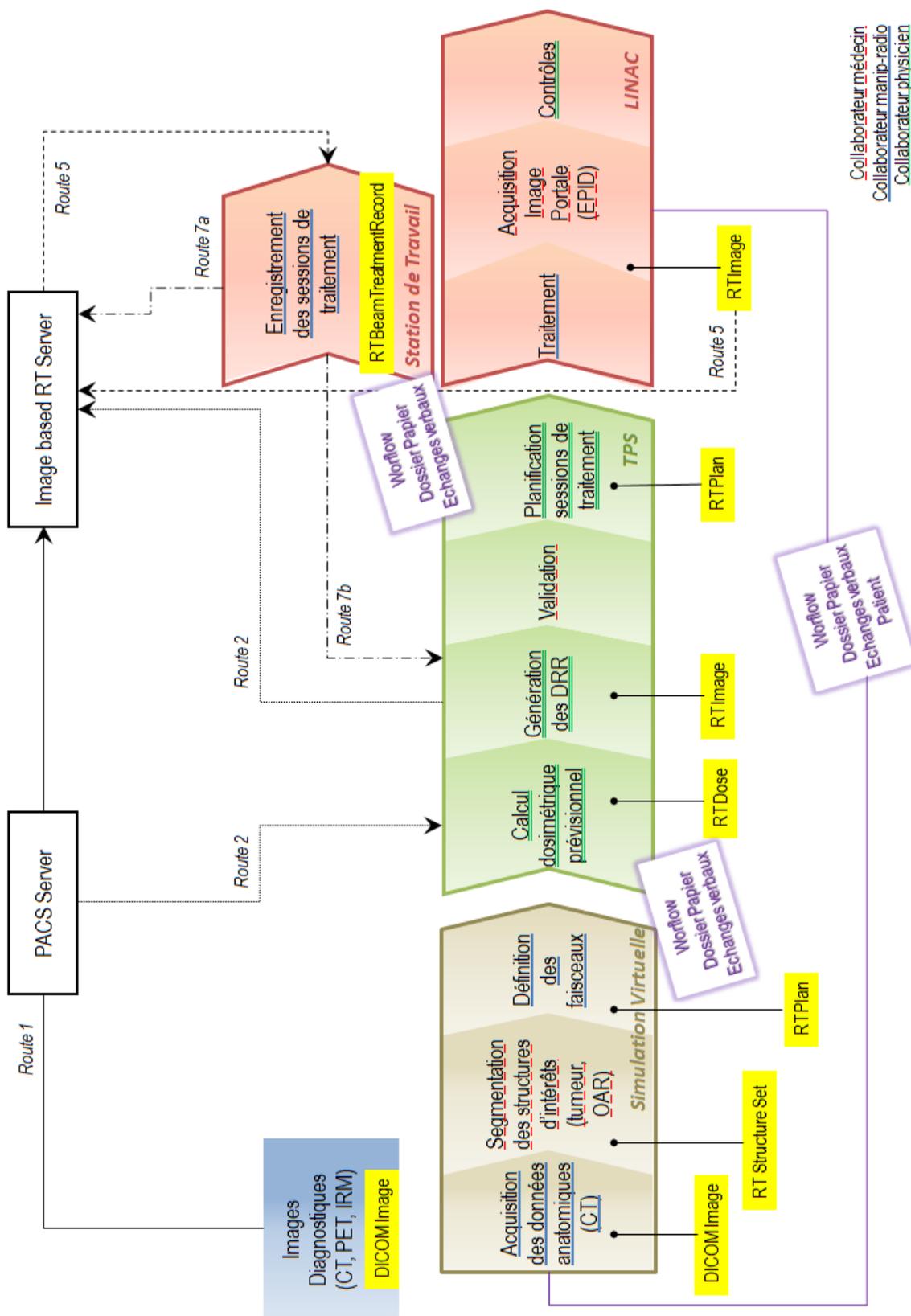


FIGURE 1.2 – Parcours du dossier patient dans le cadre d'un soin de radiothérapie externe. Les différentes étapes suivies par le patient et son dossier numérique sont mentionnées : acquisition des images anatomiques, Simulation Virtuelle, Planification de la dose avec le TPS et traitement sous le LINAC. Les différents objets du DICOM-RT sont également mentionnés ainsi que les collaborations entre les différents spécialistes médicaux (médecin, manipulateur de radiologie, physicien médical).

- Route 1 :
 - Acquisition d'images pour le diagnostic ou l'évaluation du traitement (TDM-IRM-TEP)
 - Stockage des images dans le PACS
 - Sélection des images d'intérêt et envoi vers le RTServer
- Route 2 :
 - Récupération des images anatomiques du patient à partir du PACS et transfert vers le TPS
 - Elaboration du plan de traitement : calcul de dose et génération des DRR
 - Envoi du RTPlan au RTServer
- Route 5 :
 - Acquisition des images portales (EPID²⁴) sur le LINAC
 - Envoi sur le RTServer
 - Comparaison EPID et DRR
- Route 7a : Confirmation du plan de traitement
- Route 7b : Demande de modification du plan de traitement

On peut synthétiser ce workflow en indiquant que le développement des jumeaux numériques en radiothérapie se décline *via* trois facettes :

- **Le jumeau numérique anatomique du patient** obtenu à l'aide des images acquises *via* les différentes modalités lors du diagnostic mais également lors de la séance de simulation virtuelle
Ce jumeau numérique rend possible l'estimation prévisionnelle de la dose déposée au patient en fournissant les données anatomiques, chimiques voire biologiques du patient mais rend également possible la protection des OAR *via* le contournage des organes, réalisé par les médecins.
- **Le jumeau numérique de la machine de traitement** (à travers le TPS)
Ce jumeau numérique est basé sur un modèle paramétrique, reproduisant fidèlement la géométrie et la nature de chaque pièce constitutive de la série à laquelle la machine de traitement appartient. Ce modèle est ajusté à l'aide de données expérimentales obtenues sur site. Le jumeau numérique de la machine de traitement est donc capable de fournir les paramètres physiques et géométriques spécifiques au faisceau de traitement du site, permettant ainsi la prédiction de la dose déposée au patient. Il peut également fournir les paramètres physiques et géométriques des systèmes embarqués d'acquisition des images rendant ainsi possible la prédiction des images portales et donc le contrôle voire le monitoring du positionnement du patient et/ou de ses organes.
- **Le jumeau numérique du service de radiothérapie**
Ce jumeau numérique permet la planification des séances de traitement, la prise de rendez-vous, l'enregistrement des séances et de la dose délivrée à chacune d'entre elles. Il rend donc possible le suivi global du traitement du patient.

24. Electronic Portal Imaging Device

1.2.3 Environnements d'apprentissage modernes pour la radiothérapie

Comme présenté ci-dessus, la mise en traitement d'un patient en radiothérapie est un processus complexe faisant appel à de nombreuses compétences dispatchées entre plusieurs disciplines cliniques (manipulateur en radiologie, dosimétriste, physicien médical et médecin). Pour chaque spécialité, le processus d'apprentissage associé à ces techniques requiert un temps académique au cours duquel les connaissances théoriques sont étudiées ainsi qu'un temps clinique permettant le développement de compétences plus techniques. Cependant, acquérir un niveau d'expertise nécessite d'avoir eu à traiter de nombreux cas cliniques dans des environnements différents et en pratique ce n'est pas toujours possible [7].

En développant un environnement virtuel doté de contrôles réels, l'apprentissage en groupe de ces techniques peut permettre aux étudiants de se préparer au stage clinique en leur fournissant l'opportunité d'acquérir des compétences techniques dans un environnement académique "sûr". La peur de commettre une erreur ou d'incommoder le personnel clinique et les patients est supprimée, permettant ainsi aux étudiants d'apprendre à leur propre rythme. En familiarisant les étudiants avec des équipements ou des processus complexes avant leur arrivée dans les départements cliniques, les étudiants sont en mesure de tirer le meilleur parti de ce temps précieux et de concentrer leurs efforts sur les soins des patients et d'appliquer leurs compétences techniques de manière professionnelle [8]. La formation par le biais de la simulation offre également l'opportunité d'explorer des expériences qui ne sont pas facilement disponibles dans la réalité telles que l'exploration d'erreurs de traitement ou d'étalonnages erronés [9].

VERT (Virtual Environment for Radiotherapy Training) est un environnement virtuel dédié à l'enseignement des étudiants [10] mais également à "l'éducation des patients" [11]. Cet environnement fournit un LINAC virtuel interactif et articulé pouvant être utilisé comme une machine réelle. Des équipements de contension ou de CQ peuvent être déployés de même que des dispositifs d'imagerie embarquée. Les patients sont "créés" à partir d'images DICOM anonymisées et peuvent être positionnés sous l'accélérateur. L'accélérateur est fonctionnel : il imite les mouvements et les opérations d'un vrai LINAC sans délivrer de rayonnements ionisants (voir figure 1.3).

Ce schéma numérique tend aujourd'hui à s'étendre vers d'autres spécialités médicales et tout particulièrement vers les services d'imagerie.

En effet, face à l'augmentation des doses de rayonnements dues aux examens diagnostiques, l'ASN²⁵ a mis en place des plans d'action depuis septembre 2010 afin de garantir la maîtrise des doses de rayonnements ionisants délivrés aux patients lors d'examens en radiologie interventionnelle, en radiologie conventionnelle et en scanographie. L'augmentation significative des doses de rayonnements ionisants délivrées aux patients lors des examens diagnostiques constatée dans la plupart des pays occidentaux fait de l'imagerie médicale la principale source d'exposition aux rayonnements ionisants de la population. Les incertitudes sur le risque sanitaire lié à l'exposition aux rayonnements ionisants imposent une attention particulière portée à l'évaluation de la balance bénéfice-risque pour justifier les expositions et à l'optimisation des doses délivrées aux patients. A la radioprotection des patients s'ajoute également la radioprotection des travailleurs. Cette dernière présente de forts enjeux pour les professionnels intervenant dans les blocs opératoires (actes de radiologie interventionnelle) où des dépassements de dose sont régulièrement constatés [12].

25. Autorité de Sûreté Nucléaire



FIGURE 1.3 – L’environnement VERT peut être utilisé pour la formation des étudiants en médecine et/ou radiophysique.

1.3 Vers un SIR incorporant la dose en imagerie

Ces dernières années on observe une augmentation des niveaux de dose délivrés aux patients dans le domaine de l’imagerie, en particulier pour les personnes les plus radiosensibles (les enfants et les patients dont l’efficacité de la thérapie est suivie *via* l’imagerie). L’imagerie contribue de plus en plus au diagnostic des maladies, à l’orientation de la stratégie thérapeutique, au suivi de l’efficacité des traitements et à la réalisation précise sous contrôle d’actes thérapeutiques. Cette montée en puissance de l’utilisation de l’imagerie dans le milieu médical est accompagnée par le développement d’outils similaires à ceux utilisés en RT mais dédiés à l’imagerie. Le transfert et la transposition des TPS et algorithmes de calcul de dose utilisés en RT semble aisé. Néanmoins, les processus physiques et les enjeux cliniques et dosimétriques rencontrés en imagerie étant différents de ceux rencontrés en RT, de nouveaux outils adaptés à la radioprotection en imagerie doivent être développés. Dans un premier temps, les développements ont été focalisés sur la dose reçue par le patient lors d’examens. Mais on s’oriente aujourd’hui de plus en plus vers des outils pédagogiques dédiés à la sensibilisation du personnel médical à la dose (*via* le développement d’outils de RV²⁶) et des outils de prédiction de la dose permettant une optimisation à la fois de la dose et de la QI²⁷.

26. Réalité Augmentée

27. Qualité Image

1.3.1 Prédiction de la dose en imagerie TDM

Les nombreuses initiatives destinées à sensibiliser les équipes médicales à la problématique de la réduction de la dose témoignent de l'intérêt que porte la communauté médicale à l'optimisation des protocoles en TDM. Plus récemment, les industriels du secteur ont développé de nouveaux produits, tous dans le même objectif de réduction des doses délivrées lors d'actes d'imagerie. Au travers de ces initiatives, sont tout particulièrement mises en avant les populations à risque que sont les jeunes enfants et les patients présentant des maladies chroniques nécessitant des scanners réguliers. Ce souci de maîtrise et de minimisation de la dose de rayonnement est également relayé par les autorités réglementaires et scientifiques que sont l'ASN, qui travaille actuellement à la mise en place d'un management de la qualité en imagerie, et l'IRSN²⁸ [13].

En parallèle, les industriels ont également cherché à fournir des outils permettant le suivi des pratiques et un contrôle de la dose. Depuis quelques années, GE propose DoseWatch*, un logiciel de management de la dose reçue par le patient permettant de collecter les données, de suivre les doses et de générer des comptes-rendus directement à partir des systèmes d'imagerie ou des PACS. DoseWatch est une solution multi-modalités et multi-fournisseurs, qui évalue automatiquement un indice de dose pondéré par la taille du patient (SSDE²⁹) conformément aux recommandations du Task Group Report version 204 de l'AAPM³⁰ [14]. Philips, de son côté, propose DoseWise, un outil permettant d'exploiter toutes les opportunités pour réduire la dose tout en maintenant une QI constante. Bayer Healthcare propose RadimetricsTM, un logiciel de management de la dosimétrie des patients permettant d'évaluer la dose reçue en fonction de leur morphologie. Cet outil permet une approche différenciatrice dans la prise en charge de la radioprotection des patients. Grâce à une mise en oeuvre spécifique de l'algorithme Monte Carlo et d'une vingtaine de fantômes anthropomorphes virtuels, RadimetricsTM calcule la dose équivalente et efficace à l'organe. Afin de tenir compte de chaque morphologie de patient, une estimation de la SSDE est aussi calculée.

1.3.2 Radioprotection en radiologie interventionnelle

La radioprotection a toujours été un enjeu d'importance en radiologie interventionnelle. Ces dernières années, des accidents sévères [15, 16] nous ont douloureusement rappelé que la protection des patients et des travailleurs est essentielle, bien que difficile à mettre en oeuvre :

- Les niveaux de dose, et donc de risques accessibles aujourd'hui, sont plus élevés en raison des progrès observés en imagerie (instrumentation et guidage) qui conduit à une plus grande utilisation de ces techniques. Bien que ces progrès permettent de soigner davantage de patients, ils induisent un niveau de dose au patient plus élevé que précédemment.
- En parallèle, le niveau de dose du personnel augmente, tout particulièrement la dose au cristallin [17].
- Les protocoles cliniques dépendent fortement des pratiques locales, de grosses hétérogénéités de dose (aux patients et aux travailleurs) sont observées.

La voie pour améliorer la radioprotection en radiologie interventionnelle est donc très claire, et les défis sont doubles :

- Améliorer les compétences et les connaissances des professionnels sur les bonnes pratiques en radioprotection ;

28. Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire

29. Size Specific Dose Estimate

30. American Association of Physicists in Medicine

- Fournir au personnel médical des métriques robustes (telles que la carte de dose cutanée ou la dose pic à la peau) afin d'améliorer le suivi des patients, en particulier après des procédures complexes.

Optimiser les doses et les procédures en radiologie interventionnelle est une tâche hardue pour le physicien médical : le bloc opératoire n'est que très rarement disponible, il est impossible de s'entraîner dans des conditions cliniques et difficile de réaliser des mesures. Ce contexte n'est pas unique. Le premier et le plus simple exemple venant à l'esprit est celui de la formation des pilotes d'avion, pour lesquels, bien sûr, aucune expérimentation n'est possible. Dans les années 70, ce domaine a été l'un des premiers à développer une formation complète basée sur la simulation.

L'apprentissage basé sur la simulation est maintenant reconnu comme un outil précieux pour différents domaines. Les avantages de l'apprentissage par simulation sont nombreux :

- Possibilité pour les débutants de pratiquer une gamme de scénarios ;
- Utilisation de l'outil sans monopoliser le bloc opératoire et donc sans gêner la routine clinique ;
- Apprentissage par l'erreur ;
- Utilisation de métriques pertinentes et objectives pour évaluer les pratiques professionnelles et standardiser les compétences ;
- Opportunité de s'entraîner *in silico*.

Des expériences avec des arceaux radiologiques ont conduit à des résultats probants [18, 19].

1.4 Contributions dans le domaine médical

La maîtrise de la dose délivrée constitue l'enjeu majeur de la radiothérapie et un enjeu de plus en plus important de l'imagerie, le but *in fine* étant d'avoir un historique de la dose globale (thérapie et imagerie) délivrée pour un patient donné, en particulier pour les organes à risque. Elle passe par le développement de nouvelles briques technologiques et logicielles pouvant être intégrées dans des systèmes complets et cohérents, toujours plus sûrs et performants. Quelques-unes de ces briques sont représentées sur la figure 1.4 :

- prédiction et optimisation de la dose en imagerie et impact sur la qualité image ;
- planification de la dose pour des faisceaux non-conventionnels (hadron-protonthérapie) ;
- estimation de la dose périphérique ;
- contrôle de la dose planifiée
- vérification de la dose déposée au patient à l'aide de l'imageur portal (dosimétrie portale)

Je présente ci-dessous les contributions que j'ai réalisées au cours de mon parcours dans le développement de certaines de ces briques technologiques, au sein du Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions de l'Université Paul Verlaine de Metz, du laboratoire de Contrôle Non destructif de l'INSA de Lyon et de la plateforme DOSEO du CEA LIST. Dans ce cadre médical, le financement de mes activités a été assuré par différents guichets, publiques ou privés, proposant des appels à projets. Dans les premières années, j'ai ainsi pu bénéficier d'allocations que des encadrants et/ou collègues avaient obtenues à la suite de l'instruction de leur dossier. Dans un second temps, j'ai moi-même contribué de manière significative à l'obtention de ces allocations.

Dans une première section, je présente ainsi les différents projets dans lesquels je suis intervenue et le rôle que j'y ai joué.

Dans une seconde section, je présente mes activités d'expertise, d'encadrement et d'enseignement

dans le domaine médical.

Dans une dernière section, je présente de manière synthétique l'ensemble de mes contributions. Celles qui me semblent le plus pertinentes et représentatives de mon travail sont détaillées dans les autres parties de ce mémoire.

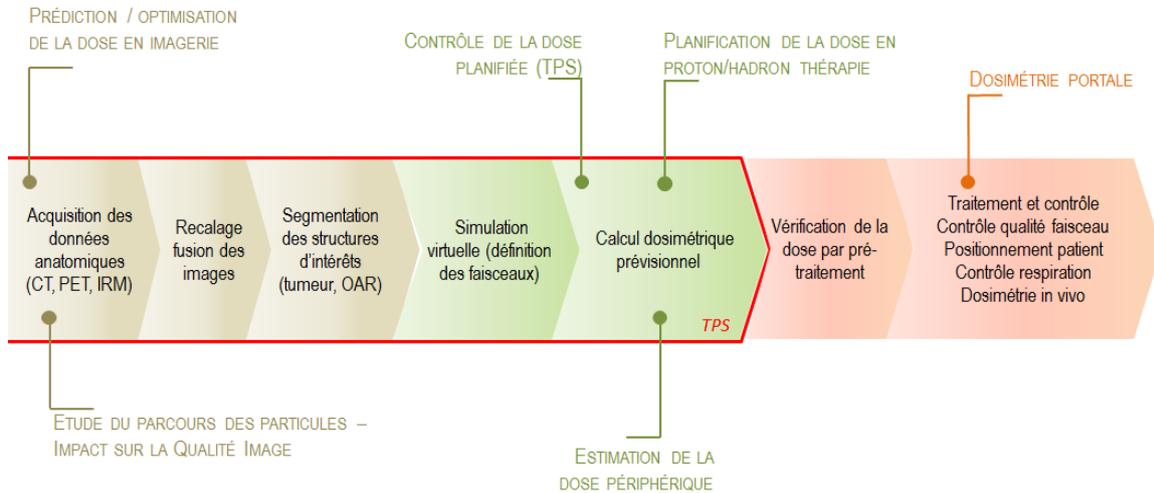


FIGURE 1.4 – Parcours complet (du diagnostic au traitement) du dossier patient dans le cadre d'un soin de radiothérapie externe. Les différentes étapes suivies par le patient et son dossier numérique sont mentionnées ainsi que les développements apportés à chaque étape par mes travaux réalisés en post-doctorat à l'INSA de Lyon et au CEA en tant qu'ingénieur de recherche sur la plateforme DOSEO.

1.4.1 Montage et gestion de projets dans le domaine médical

Le montage et la gestion de projet font parties intégrantes de toute activité de R&D. J'ai découvert cet aspect de la recherche dès mon doctorat. Afin de financer mes travaux de doctorat au LPMC³¹ de l'Université Paul Verlaine de Metz, j'ai en effet monté un projet avec mon encadrant de thèse et des physiciens médicaux du centre de radiothérapie de Esch-sur-Alzette au Luxembourg. Dans le document scientifique associé à ce projet, j'ai eu à décrire les différents développements à mener, mais j'ai également eu à présenter l'avantage que le gouvernement luxembourgeois avait à financer ces travaux. A la suite d'une instruction de 6 mois du dossier par le gouvernement luxembourgeois, j'ai obtenu une bourse doctorale de 3 ans. Ces 3 années ont été ponctuées par des livrables réguliers (tous les 6 mois) afin de présenter l'avancement de mes travaux. Les travaux de recherche effectués au cours de mon doctorat ont ainsi conduit à plusieurs collaborations transfrontalières :

- Romain Ruchaud, Stéphane Joseph : Centre Hospitalier de Luxembourg (Luxembourg-ville), Centre National de Radiothérapie (Esch-sur-Alzette, Luxembourg)
Acquisitions expérimentales sur une caméra TEP de volumes radioactifs simples et exploitation de ces résultats.
- Alain Seret, Claire Bernard : Université de Liège
Acquisitions expérimentales sur une caméra TEP de volumes radioactifs simples et reconstruction d'images.

31. Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions

- Pierre Plumer, Marc Seil : Centre de Recherches Publiques Henri Tudor (Luxembourg)
Parallélisation du programme Monte Carlo EPOTRAN sur une plate-forme BOINC.

J'ai poursuivi ce travail en mode projet au cours de mon post-doctorat, initié dans le cadre du projet ETOILE, dédié à la création d'un centre national d'hadronthérapie basé à Lyon. Cette perspective avait conduit à un intensif effort de recherche, structurée par différents programmes ou groupes de recherche nationaux, mais également européens. Le projet SimCa2 (Simulation d'une Irradiation par Ions Carbone pour le Traitement du Cancer) financé par l'ANR³² était dédié à la simulation d'une irradiation par ions carbone pour le traitement du cancer. Le but de ce projet était de développer des méthodologies et des outils pour un calcul rapide et précis de la dose déposée par un faisceau d'ions carbone dans un patient. Pour cela trois tâches avaient été planifiées :

1. implémentation d'une plateforme de simulation GEANT4 dédiée à la thérapie par ions carbone,
2. validation de cette simulation à l'aide de fantômes homogènes et hétérogènes,
3. investigation d'approches de simulation alternatives pour un calcul rapide et précis de la dose.

C'est sur ce dernier point que se sont portés mes travaux de recherche entre Janvier 2008 et Septembre 2009. Ces activités de recherche ont été menées dans un cadre pluridisciplinaire regroupant de nombreux autres laboratoires de spécialités différentes (physiciens, informaticiens, cliniciens, etc...) :

- l'IPNL (Institut de Physique Nucléaire de Lyon),
- le laboratoire CREATIS (Centre de Recherche et d'Applications en Traitement de l'Image et du Son),
- le CLB (Centre Léon Bérard pour le traitement du Cancer).

Le projet INSPIRA sur lequel j'ai travaillé au cours de mon CDD³³ au CEA LIST était un projet OSEO supporté par un consortium industriel ainsi que par de nombreux partenaires scientifiques et cliniques :

- DOSIsoft et MedasysI,
- 10 laboratoires scientifiques (CEA LIST, CNAM, INSERM, LPSC, UJF Grenoble),
- des centres cliniques (IGR, Institut Curie, CLB, CHU Grenoble)

J'étais en charge du lot consacré au CQ des TPS et avait donc des livrables réguliers à fournir sur l'avancement de mes travaux.

En 2012 j'ai été embauchée en tant que permanent au CEA LIST et plus exactement au LM2S³⁴. Ce laboratoire porte les activités de la plateforme DOSEO (plateforme technologique d'innovation, de formation et de services du CEA LIST dédiée aux nouvelles technologies dans le domaine de la radiothérapie et des techniques d'imagerie associées) en collaboration avec :

- le Laboratoire National Henri Becquerel, laboratoire national de métrologie pour les rayonnements ionisants, qui apporte toute son expertise dans le domaine de la métrologie,
- l'Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires (INSTN) qui a en charge le volet formation.

32. Agence Nationale de la Recherche

33. Contrat à Durée Déterminée

34. CEA LIST, Laboratoire Modélisation, Systèmes et Simulation

Le LM2S est quant à lui le pilote des actions de recherche technologique, qu'elle soit industrielle ou académique. Ce laboratoire travaille depuis 2006 avec la société DOSISOFT, entreprise spécialisée dans l'édition de logiciels de planification de traitement pour la radiothérapie, dans le cadre de projets nationaux financés par l'ANR et OSEO. Des contrats bilatéraux sont également en cours avec deux autres acteurs industriels du domaine :

- avec l'entreprise ESPRIMED, spécialisée dans les solutions et services en physique médicale,
- avec la société ELEKTA, constructeur d'accélérateurs linéaires pour la radiothérapie et de solutions logicielles associées.

Des collaborations sont également en cours divers centres cliniques. L'équipe participe également au projet de recherche de l'IdeX Paris-Saclay intitulé PIM (Physique et Imagerie en Médecine) accepté en Janvier 2014.

Dans ce contexte, j'ai été amenée à monter des projets et des collaborations plutôt académiques en répondant à divers guichets de financement mais également à rédiger des propositions techniques et financières pour des industriels souhaitant travailler avec nous. Le tableau 1.1 synthétise l'ensemble de ces actions réalisées au LM2S.

TABLE 1.1 – Montage de projets et de Propositions Techniques et Financières au CEA LIST.

Année	Appel A Projet	Durée Montant	Coordination	Thématique	Collaborations	Financement
2014	ASTRE ³⁵ (F)	24 mois 199644 €	Oui	Equipements plateforme DOSEO		Non retenu
2014	PhysiCancer (F)	24 mois 227672 €	Non	IGMAR (ImaGe and dose Management in Adaptive Radiotherapy)	Centre Eugène Marquis	Non retenu
2015	ANSM ³⁶ (F)	28 mois 296890 €	Oui	QuaDoS (Qualité et Dose en Scanner)		Retenu
2015	EMPIR PTR! ³⁷ (E)		Oui	Metrology for dosimetry and image quality in medical imaging	LNE (FR) - NPL (UK) ENEA (IT) -STUK (FI)	Non retenu
2015	PhysiCancer (F)	36 mois 574720 €	Non	TOOPEAR (new TOOLS for PERipheral doses in Advanced Radiotherapy)	IRMA/UMR-CNRS 6249 CHBM-CHRUB IRSN - CFB	Non retenu
Année	Industriel	Durée Montant			Thématique	
2015	Radiation Therapy Consulting		Oui	Développement d'une plateforme complexité des plans de traitement		

1.4.2 Activités d'encadrement, d'enseignement et d'expertise

"Enseignement" et "recherche" sont pour moi deux volets indissociables d'un même métier, l'un nourrissant l'autre et vice-versa. Les pratiques mises en oeuvre dans ces deux domaines sont en effet similaires. Lorsque l'on est amené à intervenir dans le cadre d'une formation, ou d'un encadrement, il faut garder en mémoire l'importance :

- d'appliquer le même raisonnement scientifique à l'activité d'enseignement qu'à l'activité de recherche,
- d'être familiarisé avec les connaissances pédagogiques mises en évidence dans la recherche,
- d'être capable de formuler une philosophie de l'enseignement et de l'appliquer,
- d'être capable d'adopter une approche réflexive et critique sur ses propres pratiques d'enseignement,
- d'être capable de confronter ses propres pratiques d'enseignement à celles des autres,
- d'être capable d'analyser son expérience et de partager ses analyses en participant à des séminaires, en écrivant des articles et en donnant des conférences.

Malgré le fait que je ne sois pas maître de conférence, je pense que les volets "enseignement" et "recherche" sont indissociables, l'un nourrissant l'autre et vice-versa. Au cours de mon cursus académique puis professionnel, j'ai toujours cherché à transmettre les connaissances que j'avais acquises, en premier lieu par le biais de cours particuliers, lorsque j'étais moi-même étudiante, puis par le biais d'interventions plus formalisées devant un public moins restreint, plus âgé et plus expérimenté. Cette évolution dans le public visé m'a permis de me former progressivement et de faire évoluer mes compétences dans ce domaine.

Ma spécialisation acquise dans le domaine de la physique médicale avec l'obtention en 2010 du DQPRM³⁸ ainsi que mon expertise développée dans le domaine de la simulation Monte Carlo au cours de mes 12 premières années dans le domaine de la R&D m'ont donné l'occasion d'enseigner dans ces thématiques ainsi que d'encadrer une doctorante :

- En 2012, dans le cadre d'une collaboration avec l'université de Rennes et le Centre Eugène Marquis de Rennes, je me suis vu proposer, avec une collègue du LM2S, une intervention de 6 heures sur "les applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" dans le Master 2 de Physique Médicale. Nous avons donc mis en place cette intervention à deux avec une intervention biennale de chacune d'entre nous. Je poursuis actuellement cette intervention de façon annuelle depuis l'année universitaire 2018-2019. Ces six heures d'ouverture sur les méthodologies Monte Carlo sont focalisées sur les bases théoriques de la méthode Monte Carlo et leurs déclinaison dans le domaine médicale pour les activités de R&D mais également les applications en routine clinique. Une manipulation du module géométrique du code PENELOPE est également proposée pour mettre les étudiants face à une situation pratique.
- Dans le cadre des activités de la plateforme DOSEO, j'ai proposé, mis en place et animé jusqu'à mon départ en 2016 deux modules optionnels pour le DQPRM, diplôme délivré par l'INSTN³⁹ de Saclay. Ces deux modules, "Calcul de dose en radiothérapie" et "Calcul de dose en imagerie", respectivement de douze et neuf heures, sont focalisés sur les différentes méthodes disponibles en routine clinique et en R&D pour estimer les niveaux de dose aux patients en radiothérapie et imagerie. Ils sont composés d'un enseignement théorique mais

38. Diplôme de Qualification en Physique Radiologique et Médicale

39. Institut National des Sciences et Techniques du Nucléaire

également de séances de mise en situation sur les équipements de la plateforme DOSEO (accélérateur VersaHD d'Elekta, accélérateur True Beam de Varian et TDM General Electric Discovery CT750 HD).

- Suite à l'obtention du CAMARI⁴⁰ en 2014, l'équipe pédagogique de l'INSTN de Cherbourg en charge de cette formation a sollicité la responsable de la plateforme DOSEO afin de profiter des équipements de la plateforme pour réaliser des travaux pratiques dans le cadre de la formation CAMARI. J'ai participé, en tant que responsable des équipements de la plateforme, aux deux sessions qui ont eu lieu en 2014-2015.
- De 2012 à 2015, j'ai encadré Camille Adrien en doctorat sur le "Développement d'un module de planification de l'examen en imagerie radiologique pour une optimisation de la qualité image en fonction de la dose délivrée". Encadrer et accompagner un étudiant sur une période longue a mis en évidence pour moi la relation de coopération qui se crée entre un encadrant et un doctorant, et qui contribue au développement de l'autonomie professionnelle et à la prise de responsabilités de ce dernier.

1.4.3 Activités scientifiques dans le domaine médical

Je présente dans ce paragraphe, de manière synthétique, l'ensemble de mes contributions dans le domaine médical. Les contributions qui me semblent les plus pertinentes et représentatives de mon travail sont détaillées dans des chapitres spécifiques.

Simulation Monte Carlo de suivi de positrons et de photons dans l'eau. Application à la Tomographie par Emission de Positrons

Le sujet des travaux de recherche effectués au cours de mon doctorat consistait à contourner la difficulté liée au seuillage utilisé pour visualiser les images obtenues en tomographie par émission de positrons (TEP), de manière à obtenir des images tumorales plus précises qui par la suite pourraient être utilisées en radiothérapie. Pour cela, nous avons proposé à nos collaborateurs cliniciens (Centre de Radiothérapie de Esch-sur-Alzette, Luxembourg) de mettre à profit la simulation Monte Carlo que nous avons développée au sein du laboratoire pour décrire le transport d'électrons et de particules lourdes chargées dans l'eau.

Lors de cette étude, nous avons donc cherché à décrire dans les détails les plus fins (à l'échelle de la cellule) les dépôts d'énergie induits par le positron dans la matière biologique, et ce à partir de la simulation Monte Carlo de suivi de trace que nous avons déjà mise au point pour les électrons et les ions. Cette modélisation a été complétée pour décrire le suivi des positrons, notamment par l'implémentation, que j'ai réalisée, du processus de capture calculé par l'équipe du LPMC de l'Université Paul Verlaine de Metz. L'intérêt de ce travail est multiple. D'une part, il permet de mesurer les risques encourus par le patient soumis à une irradiation β^+ , ce qui est le cas lors d'examens médicaux comme la TEP. J'ai ainsi mis en évidence des différences notables entre les différents isotopes utilisés en TEP en termes de résolution spatiale et de dépôt d'énergie ([20, 21, 22]). D'autre part, la simulation numérique de transport de positrons dans la matière biologique, couplée à la simulation de suivi de photons dans l'eau que j'ai développée, a permis d'appréhender avec précision la détection des photons après annihilation des positroniums (paires électron-positron formées lors du ralentissement du positron dans la matière). Une modélisation simple des paramètres géométriques et physiques de l'appareil de détection nous a ainsi permis de quantifier le nombre d'événements

40. Certificat d'Aptitude à Manipuler les Appareils de Radiologie Industrielle

de chaque type détectés sur l'anneau soit le nombre de paires de photons dits diffusés, fortuits et vrais. A partir de ces données, il nous a été possible de construire un sinogramme (algorithme que j'ai implémenté) nous permettant la reconstruction d'images TEP et la détermination du seuillage correspondant.

Développement d'une stratégie d'accélération des calculs dosimétriques en hadronthérapie

Dans le cadre de mon post-doctorat à l'INSA de Lyon, je me suis penchée sur le développement d'une méthode hybride permettant une estimation fiable et rapide de la dose en hadronthérapie. L'hadronthérapie est une technique adaptée au traitement des tumeurs profondes permettant de préserver les tissus sains environnants. Les ions présentent des caractéristiques physiques et radiobiologiques qui diffèrent des faisceaux de radiothérapie conventionnels (électrons et photons) : une distribution de dose en profondeur avec une dose d'énergie élevée délivrée en fin de parcours par le pic de Bragg, une production locale dense d'électrons qui contribue à la mort des cellules cancéreuses, un EBR⁴¹ élevé par rapport aux photons gamma et une faible diffusion.

Développer des protocoles efficaces pour administrer des doses élevées aux tumeurs tout en préservant les tissus sains nécessite des efforts communs d'experts de différents domaines (biologistes, physiciens, ingénieurs, experts en informatique, etc ...). Les avancées technologiques informatiques ont conduit à un intérêt élevé pour les méthodes MC⁴². Ce sont les techniques les plus précises pour modéliser tous les effets impliqués dans les irradiations par ions, mais elles sont aussi trop lentes pour une application optimisée en pratique clinique. Les méthodes déterministes semblent donc mieux adaptées à la pratique clinique car plus rapides. Elles peuvent cependant être relativement imprécises, en particulier dans des régions de fortes hétérogénéités.

L'hybridation de calculs Monte Carlo et de calculs déterministes s'est déjà révélée une approche fructueuse pour simuler la diffusion multiple des photons en imagerie par rayons X et en radiothérapie par rayonnement synchrotron [23, 24]. Nous avons donc proposé le développement d'un code hybride combinant la précision de la simulation MC et la rapidité d'un code déterministe basé sur des données générées par une SMC⁴³. L'algorithme que j'ai implémenté dans GEANT4 est basé sur le splitting des processus de fragmentation : pour chaque collision hadronique inélastique, plusieurs ensembles de particules secondaires sont créés et ensuite traitées de manière déterministe pour déposer leur énergie.

Pour construire cette simulation hybride, j'ai réalisé des études préliminaires GEANT4 pour déterminer les distributions de dose en profondeur de toutes les particules chargées impliquées dans une irradiation ionique (ces distributions constituent l'entrée du code de dépôt de dose analytique). Les premiers résultats obtenus avec un faisceau de carbone de 250 MeV/u frappant une cuve à eau ont fait l'objet d'une présentation au Workshop "Hadron beam therapy in cancer" en 2009 [25].

Développement d'un outil de contrôle qualité des TPS par simulation Monte Carlo

Les codes de simulation basés sur les méthodes statistiques Monte Carlo commencent à être développés en vue de leur utilisation clinique dans le domaine de la radiothérapie pour le calcul de la dose délivrée au patient dans le cadre du traitement du cancer. Cependant leur utilisation reste encore très ponctuelle et la majorité des calculs de dose sont réalisés à l'aide d'algorithmes

41. Efficacité Biologique Relative

42. Monte Carlo

43. Simulation Monte Carlo

analytiques classiques plus rapides mais moins précis dans certaines configurations.

Un nouveau développement proposé dans le cadre d'un projet OSEO (INSPIRA) a montré la faisabilité de réaliser le contrôle qualité dosimétrique de tous les TPS au moyen de simulations Monte Carlo réalisées avec le code PENELOPE. En effet, ces simulations peuvent se substituer avantageusement au processus habituel qui consiste à comparer les distributions de dose calculées avec le TPS avec des mesures dosimétriques. Cette solution permet d'envisager le contrôle qualité du TPS sans monopoliser les appareils de traitement avec, de plus, des précisions supérieures à celles des mesures.

Le nouveau système que j'ai développé au cours de ce projet s'appelle PENSSART pour PENELOPE Simulation for the Safety in Radiotherapy. Il est divisé en trois modules :

- Le **module de calcul de la dose** est basé sur la version 2006 du logiciel PENELOPE. Ce dernier a été adapté pour permettre des calculs de dose MC dans des géométries voxélisées. Il nécessite comme donnée d'entrée une description de la géométrie ainsi qu'une description de la source de rayonnement fournie par un module géométrie et un module source de rayonnement, respectivement.
- Le **module source de rayonnement** est également basé sur la version 2006 de PENELOPE. Il permet de simuler différents types de sources de rayonnement, à partir de sources simples telles que les sources monoénergétiques, des sources plus complexes comme celle résultant de la modélisation complète d'une tête de traitement d'un accélérateur linéaire. Pour générer des fichiers d'espace des phases (PSFmc⁴⁴) résultant de la description complète d'un linac, une nouvelle version du programme PENMAIN, dans lequel plusieurs techniques classiques de réduction de variance (roulette russe, splitting du rayonnement de freinage, échantillonnage d'importance) ont été développées, est disponible.
- Le **module géométrie** a été mis en oeuvre pour aider l'utilisateur dans la description de géométries complexes (fantômes, patients).

Au cours de ce travail, un accent spécifique a été mis sur la conversion d'images médicales DICOM obtenues par un TDM en données MC. J'ai développé une caractérisation précise des tissus biologiques en utilisant une méthode de conversion similaire à celle proposée par [26]. Cette méthode est basée sur une méthode d'étalonnage stoechiométrique utilisant des sous-ensembles de tissus équivalents du point de vue dosimétrique. Ce travail a fait l'objet d'une présentation à MCTP2012 [27]. Afin de permettre la modélisation de modalités dynamiques (filtres dynamiques, RCMI, VMAT) au cours desquelles différents éléments de l'accélérateur sont en mouvement, j'ai implémenté une méthode statistique d'échantillonnage des positions des éléments collimatant le faisceau appelée PPS (pour Position Probability Sampling) [28] dans la plateforme, pour le cas d'un filtre dynamique [29] puis, dans le cas d'un collimateur multi-lames (MLC - collimateur spécifique composé de lames permettant de cibler précisément la tumeur quelque soit sa forme). Dans le cas du MLC, les données DICOM du fichier de traitement (angle du bras, position de chaque mâchoire et de chaque lame, nombre d'unités moniteur⁴⁵ associé) sont lues puis formatées sous un format lisible pour la plateforme. Les unités moniteur sont utilisées pour créer une densité de probabilité dans laquelle les différents segments du champ MLC sont tirés au sort. En fonction du segment « choisi », les éléments mobiles de la géométrie sont déplacés afin de correspondre aux positions correspondant au segment. Des simulations pour des champs de prostate ont été réalisées afin de valider l'implémentation de la méthode. La figure 1.5 représente la fluence obtenue pour un champ composé de 9

44. Phase Space File

45. grandeur propre à l'accélérateur qui représente un certain nombre de particules émis par la source

segments pour un temps de calcul de 96 heures sur un processeur. La figure 1.6 représente quant à elle la distribution de dose obtenue pour ce même faisceau dans un fantôme d'eau thoracique. Un profil de dose le long de l'axe x est également tracé. La modulation le long de cet axe y est bien visible.

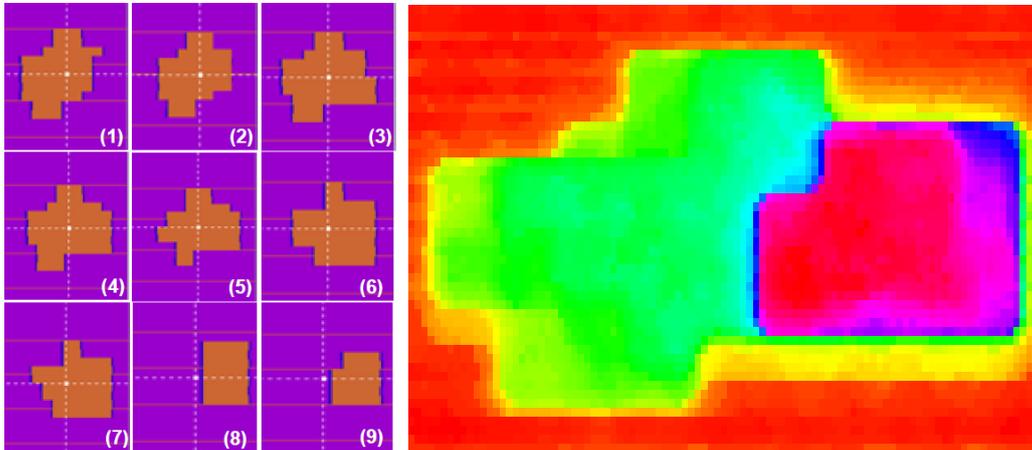


FIGURE 1.5 – Champ modulé obtenu avec PENSSART pour un champ modulé de prostate.

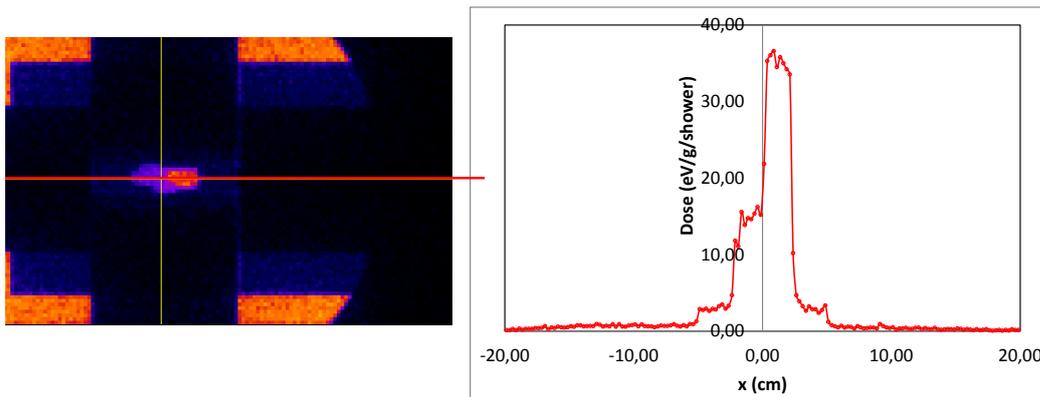


FIGURE 1.6 – Distribution de dose obtenue dans une cuve à eau pour le champ modulé (gauche) et profil de dose obtenu le long de l'axe x (à droite).

Développement de méthodologies d'estimation de la dose pour l'imagerie médicale

Suite à mon CDD au CEA LIST, j'ai été embauchée en tant qu'agent CEA tout en restant dans la même équipe, soit le LM2S. J'ai ainsi pu poursuivre les travaux initiés au cours de mon CDD, en appliquant la plateforme PENSSART développée alors pour le CQ des TPS à l'imagerie médicale.

- **Estimation de cartes de dose modulées en imagerie portale**

Ainsi, les modules source de rayonnement et géométrie de la plateforme PENSSART ont ils été mis en oeuvre pour valider la modélisation d'un imageur portal et l'algorithme de débruitage associé. Historiquement conçu pour vérifier le positionnement du patient sous l'accélérateur

en radiothérapie, les dispositifs d'imagerie portale (EPID) sont aujourd'hui largement utilisés dans les contrôles qualités patient pour vérifier la distribution de dose déposée, en particulier pour les modalités de traitement les plus complexes (soit ceux avec modulation d'intensité). Bien que très gourmande en temps de calcul, la simulation MC est aujourd'hui la technique la plus appropriée et la plus précise pour prédire fidèlement des cartes de fluence énergétique et de dose au détecteur. De ce point de vue elle surmonte les limites des méthodes de convolution utilisées habituellement. Cependant, si on prend en compte la taille réelle des pixels des images portales acquises par les EPIDs d'aujourd'hui (soit 0.4 mm) le calcul d'une image avec un niveau de bruit de l'ordre de 0.5% nécessite un temps de calcul incompatible avec une application clinique. Le compromis généralement choisi est d'augmenter la taille des pixels afin de diminuer le temps de calcul tout en conservant le niveau de bruit dans les images. Ainsi les images portales obtenues par simulation MC ont, en général, une résolution de l'ordre de 2 mm, soit 5 fois moins fine que l'image portale expérimentale, ce qui conduit à des images prédites plus floues que les images obtenues sous l'accélérateur. Certains effets dus au MLC sont alors moins bien représentés ce qui peut conduire à des erreurs d'interprétation lorsque images expérimentales et simulées sont comparées et donc à des erreurs sur le positionnement et la quantification de la dose.

Une nouvelle technique de débruitage basée sur un formalisme bayésien non paramétrique a alors été proposée au sein du LM2S afin de permettre la simulation MC d'images portales de résolution similaire à celle des images expérimentales et dans un temps de calcul raisonnable. Cette nouvelle méthode a été comparée en termes de capacités de lissage et de temps de calcul avec deux autres algorithmes classiquement utilisés dans le domaine médical pour des faisceaux collimatés avec un MLC. Le modèle que j'avais alors développé au cours de mon CDD a ainsi pu être valorisé et a permis de montrer la fluidité de l'algorithme de débruitage sur les configurations testées [30].

- **Estimation de la dose au patient en radiologie interventionnelle**

Dans le domaine de la radiologie interventionnelle, j'ai participé au développement de l'estimateur dédié au calcul de dose au patient du simulateur em.SIM. Ce simulateur est un outil dédié au calcul de dose et à l'apprentissage en radiologie interventionnelle. Il a été développé conjointement par la start-up française ESPRIMED, et le CEA-LIST (LM2S et DIASI). C'est à la fois :

- un simulateur de réalité virtuelle capable de représenter avec précision un bloc opératoire de radiologie interventionnelle (figure 1.7),
- un premier estimateur MC de la dose déposée au patient (dose aux organes, carte de dose à la peau, dose pic à la peau) permettant un suivi dosimétrique optimisé du patient,
- un second estimateur MC de la dose permettant un calcul en temps réel de la dose en tout point de la salle dans un environnement virtuel

L'estimateur de calcul de dose au patient est basé sur la plateforme PENSSART. Les travaux ont été réalisés par une personne en CDD, Mercedes Lopez-Noriega, que j'ai encadrée. Le module source de la plateforme PENSSART est dédié à la modélisation du tube de rayons X utilisé en radiologie interventionnelle, basée sur des données constructeur et/ou des données disponibles dans la fiche technique de l'appareil. A l'aide des paramètres standard d'acquisition (kV, mAs, angle, taille de champ) et un fichier DICOM RDSR⁴⁶, em.SIM est capable de

46. Radiation Dose Structured Report



FIGURE 1.7 – Configuration typique pour l'évaluation d'une procédure en cardiologie avec l'outil em.SIM

calculer la dose déposée au patient dans une géométrie voxélisée obtenue en général à l'aide d'images TDM du patient. Les données dosimétriques (cartes de dose et dose pic à la peau) sont ensuite déduites pour permettre le suivi dosimétrique du patient. Un exemple de carte de dose cutanée et de dose pic à la peau est fourni sur la figure 1.8. Cet estimateur a été validé à l'aide de mesures que nous avons réalisées avec des détecteurs OSL⁴⁷ positionnés dans des fantômes anthropomorphes. L'écart entre doses mesurées et simulées est inférieur à 3.5%. Ces résultats ont fait l'objet d'une présentation aux Journées Françaises de Radiologie en 2013 [31].

- **Outil d'aide à la décision en TDM**

Ces dernières années, la multiplication du nombre d'actes d'imagerie scanographique a eu pour conséquence l'augmentation de la dose collective due aux examens d'imagerie médicale. La dose au patient en imagerie scanographique est donc devenue un enjeu de santé publique majeur impliquant l'optimisation des protocoles d'examen, ces derniers devant tenir compte de la qualité image, indispensable aux radiologues pour poser leur diagnostic. En pratique clinique, l'optimisation est réalisée à partir d'indicateurs empiriques ne donnant pas accès à la dose aux organes et la qualité image est mesurée sur des fantômes spécifiques, tel que le fantôme CATPHAN®. Sans aucune information sur la dose aux organes et aucun outil pour prendre en compte l'avis du praticien, il est difficile d'optimiser correctement les protocoles. Afin de répondre à cette optimisation délicate entre dose au patient et qualité diagnostique, un travail de thèse a été mené par Camille Adrien. J'ai encadré ce travail de thèse pendant 3 ans et participer de façon active aux différentes acquisitions expérimentales pour l'étude basée sur la dose au patient mais également sur la qualité image.

47. Optically Stimulated Luminescence

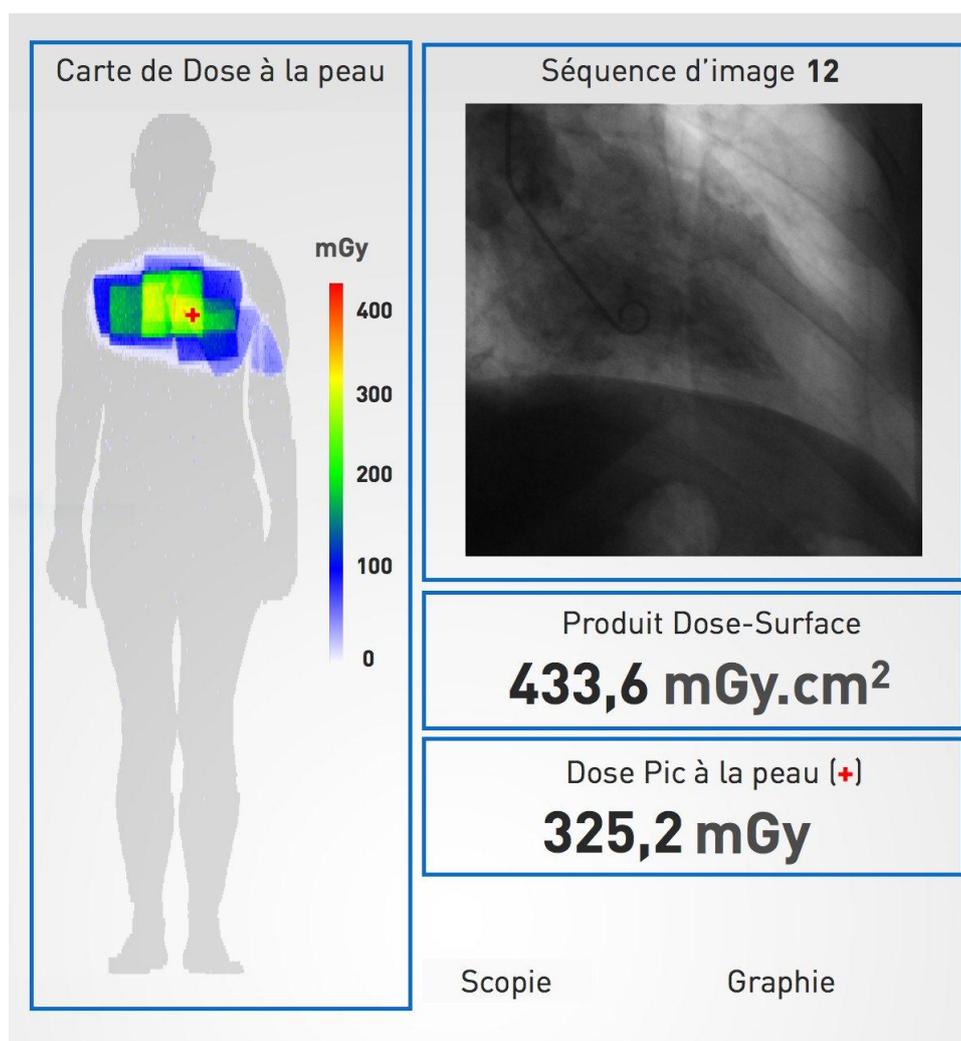


FIGURE 1.8 – Carte de dose à la peau, dose pic à la peau et séquence d'images associée

L'objectif de ce travail de thèse était de développer un outil permettant l'optimisation de la dose au patient tout en préservant la qualité image nécessaire au diagnostic. Il a été atteint par la mise en évidence de la faisabilité d'une telle optimisation et la mise en place d'un squelette d'un outil d'aide à la décision basé sur un critère dosimétrique et un critère de qualité image objectif.

Cette contribution correspond à mon premier encadrement de thèse et est donc pour moi majeure dans la démarche d'accompagnement d'un étudiant. Elle est détaillée dans la partie 8.

- **Monitoring du dépôt de dose en radiothérapie par photoactivation**

Suite à plusieurs discussions et prises de contact en interne CEA, avec notamment David Tisseur (CEA/DRT), Dominique Chambellan (CEA/DRT) et Olivier Limousin (CEA/DRF), j'ai préparé et participé aux premiers essais visant à développer une méthode de monitoring de dépôt de dose en radiothérapie par photoactivation des nanoparticules d'or via l'analyse de la fluorescence de ces nanoparticules. Ces travaux ont abouti à la publication d'un article

[32] et à la naissance d'une collaboration scientifique transversale entre différentes directions du CEA. Le projet SATBOT (Spectro-imageurs d'Assistance à la radioThérapie roBOTisée) soumis à l'appel d'offre interne CEA nommé "DRF Impulsion 2016" a ainsi pu voir le jour. Cette contribution est pour moi majeure dans la démarche de recherche de collaborateurs issus d'horizons différents pour répondre à une problématique médicale. Elle fait donc l'objet d'un focus dans la partie 5.

Les progrès récents de l'informatique ont permis la mise en place dans les services cliniques de réseaux complexes permettant le stockage de données importantes et le suivi dosimétrique des patients. En parallèle les progrès de l'imagerie médicale, notamment, ont permis de concevoir de nouveaux modèles numériques et personnalisés du patient, au service de la médecine. Ces modèles visent à mieux quantifier les observations en particulier en diagnostic, à planifier, simuler et contrôler un traitement en radiothérapie afin d'en optimiser les effets, à suivre de façon globale la dosimétrie d'un individu voire du personnel soignant et à former à la fois les praticiens et les équipes paramédicales mais également le patient.

Cette évolution change peu les compétences des professionnels de la santé mais elle modifie davantage leur manière d'interagir et d'opérer au quotidien.

Il en est de même dans le secteur du nucléaire où le numérique a déjà fait ses preuves via le BIM (Building Information Modeling) qui permet le partage d'informations fiables tout au long de la durée de vie d'un bâtiment ou d'infrastructures à l'aide d'une maquette numérique paramétrique 3D (caractéristiques physiques et fonctionnelles) et des méthodes de travail associées. A de tels outils numériques il est aujourd'hui possible de pliquer d'autres logiciels, tels que des outils de calcul de dose et de radioactivité pour connaître à l'avance les débits de dose auxquels les opérateurs pourront s'exposer.

Chapitre 2

Les outils numériques du nucléaire

Un grand nombre de centrales nucléaires existantes dans le monde ont atteint plus de la moitié de leur durée de vie de fonctionnement. En parallèle, un regain d'intérêt pour la filière nucléaire est en cours dans certains pays européens (par exemple le Royaume-Uni). La simulation informatique des processus en cours dans les réacteurs nucléaires joue donc un rôle important, non seulement du point de vue scientifique, mais également du point de vue de la mise en oeuvre pratique de la production d'énergie à partir de la fission, ainsi que de la réglementation et de l'accréditation indépendantes des technologies de fission. Ainsi, l'évaluation de la sûreté des opérations quotidiennes des centrales nucléaires ainsi que l'optimisation des performances des réacteurs ne peuvent aujourd'hui être réalisées sans l'application d'outils de simulation permettant des calculs détaillés de la neutronique, de la thermohydraulique, de la mécanique et de la sécurité et d'autres processus qui se déroulent au coeur d'une centrale nucléaire. La numérisation, parce qu'elle réduit la re-saisie des données, réduit les erreurs humaines et *de facto* renforce la sûreté. Elle est aussi un gain de temps : l'utilisation systématique de "tablettes" peut par exemple permettre à un salarié travaillant sur une opération de maintenance nucléaire de s'épargner des déplacements et d'augmenter son " temps opérationnel " [33].

Cependant ces nouveaux outils numériques peinent à être mis en oeuvre dans le domaine nucléaire pour différentes raisons :

- les centrales nucléaires ont été construites dans les années 60s et le processus d'acquisition de licences d'exploitation (ou décrets d'autorisation de création et de mise en service d'installations nucléaires) est complexe [34],
- le secteur civil de l'énergie nucléaire, qui connaît un déclin depuis 20 ans au niveau international, a eu du mal à mettre en oeuvre ces technologies à un rythme proche de celui des autres secteurs en partie en raison de la nécessité de convaincre les autorités de sûreté [35],
- la gestion des données numériques dans l'industrie est soumise à la réglementation en matière de sécurité dans le but de protéger les données sensibles et d'éviter le risque de prolifération. Ces facteurs ont constitué des obstacles à l'introduction de la technologie de l'information dans l'industrie nucléaire et l'effet de ces facteurs a été amplifié par la crise économique [35].

Selon [33] ce retard pourrait constituer une opportunité en permettant aux entreprises du secteur nucléaire de bénéficier du retour d'expérience d'autres industries. Des efforts ont déjà été mis en oeuvre pour créer des représentations virtuelles de composants nucléaires. Citons par exemple le programme NEAMES qui constitue une tentative coordonnée de développements d'outils de si-

mulation avancés pour l'industrie nucléaire allant du "granulé à la centrale" (*pellet-to-plant*) et comprenant des boîtes à outils pour des applications relatives à la performance du combustible, au fonctionnement du réacteur, aux garanties et à la gestion des déchets [35]. Un certain nombre de programmes de recherche financés par l'UE¹ ont toujours eu des objectifs similaires, historiquement et actuellement. Les efforts de recherche se concentrent principalement sur la construction de modèles multi-échelles [35]. La filière industrielle française souhaite aujourd'hui s'appuyer sur les technologies numériques pour améliorer la compétitivité de ses projets [33].

Dans le nucléaire, tout l'enjeu consiste à recueillir et collecter efficacement les données au cœur des installations, les transporter et les acheminer en tenant compte des contraintes de sécurité et de confidentialité, les traiter et les analyser, visualiser les résultats pour être en mesure de prendre les meilleures décisions au moment opportun. L'objectif est de maximiser l'utilisation des actifs, d'optimiser les coûts de production et de protéger les opérateurs. Des briques numériques sont déjà mises en oeuvre dans le domaine nucléaire, tant du côté industriel qu'académique. Nous allons dans un premier temps présenter ces briques technologiques puis présenter les plateformes intégrées basées sur ces briques qui ont déjà été proposées dans la littérature ou mises en oeuvre dans l'industrie en se focalisant finalement sur les applications dans le secteur spécifique du démantèlement des installations nucléaires.

2.1 Les briques numériques existantes

Il existe déjà un panel assez large de technologies numériques (big data, fabrication additive, réalité augmentée, analyse et traitement des données à grande échelle, objets connectés, modélisation et simulation numériques, etc.). Ces « briques », hétérogènes et isolées, ont deux atouts : elles s'intègrent facilement aux installations existantes et s'articulent entre elles, telles des pièces de Lego.

2.1.1 Outils d'ingénierie numériques

L'utilisation d'outils d'ingénierie numériques tout au long de la vie des projets et des infrastructures, le DAM², assure la continuité des données entre les différents intervenants et dans le temps, tout au long des différentes phases des projets. L'apport du numérique dans le nucléaire permet ainsi de garantir l'intégrité des données depuis la conception jusqu'au démantèlement des installations. Identifier et résoudre les difficultés techniques en amont de la construction, optimiser les activités de maintenance et d'exploitation, garantir la traçabilité de la conformité des équipements sont rendus possibles par l'exploitation de ces données. En complément, la capitalisation du retour d'expérience est grandement facilitée ce qui favorise la notion de ré-utilisation, gage de performance pour la réalisation de nouveaux projets. Utilisé dès la phase de conception, le DAM permet de donner une meilleure lisibilité des projets à long terme, de maîtriser les coûts de construction comme d'exploitation et par conséquent de déterminer au plus juste le prix final du kWh, de plus en plus contractualisé avec l'exploitant. L'intégration de ces technologies numériques dans les secteurs de l'aéronautique et de l'automobile a permis un gain de productivité compris entre 20% et 50% en favorisant le partage de données sûres et cohérentes et en limitant fortement le nombre d'itérations dans les études (limitation des travaux supplémentaires). Le DAM rassemble un ou plusieurs outils

1. Union Européenne

2. Digital Asset Management

d'ingénierie numérique qui peuvent être utilisés en parallèle tels que le PLM³ ou le BIM [33]. Le PLM vient numériser l'ensemble des processus d'ingénierie et les données associées afin d'améliorer l'efficacité de la gestion de projet. Il collecte et archive sur l'ensemble de la durée de vie d'un projet les données relatives à la conception, la construction et l'exploitation d'une infrastructure. Le PLM permet ainsi d'assurer la continuité de l'information auprès de l'ensemble des intervenants impliqués dans le projet, enjeu crucial dans le nucléaire, secteur dans lequel les projets sont extrêmement longs. Mis en application dès le démarrage du projet ITER⁴, le PLM a ainsi permis d'économiser environ 15% sur les missions d'études réalisées par certains partenaires. Complémentaire au PLM, le BIM, ou modélisation des données du bâtiment, est l'autre grande solution numérique qui vient révolutionner la conception et la construction des infrastructures. Avec cette solution, les erreurs et conflits apparaissent très en amont, dès la phase projet. La maquette numérique permet d'effectuer les ajustements nécessaires et d'en suivre les applications tout au long de la phase de conception, et ce, avant de commencer la construction. Tous les intervenants ont accès aux données et peuvent réaliser en temps réel l'impact d'une modification sur l'ensemble du projet. Cette technologie facilite donc la collaboration et la transparence, en réduisant le risque de déperdition d'informations. Pour des chantiers de grandes dimensions, le BIM, à travers la conception d'un jumeau numérique du bâtiment, s'avère un allié essentiel pour l'optimisation des délais et donc des coûts.

2.1.2 La réalité virtuelle

La réalité virtuelle est un outil collaboratif qui sert la performance des projets, réinvente les modes de travail et permet un gain de temps et une communication plus fluide entre les acteurs d'un même projet incités à collaborer pour « faire bien du premier coup » et au moindre coût.

Le concept de la réalité virtuelle est resté longtemps théorique, limité par la technologie et les puissances de calcul associées. De fait, la réalité virtuelle a souvent été restreinte à des applications destinées à la conception automobile ou au domaine militaire. Le développement de la réalité virtuelle est lié à celui de la CAO⁵.

La réalité virtuelle peut être utilisée dès la conception, en impliquant très en amont les acteurs, depuis les équipes d'ingénierie jusqu'aux exploitants. Simuler des interventions sur site, dans toutes les zones d'une usine y compris celles inaccessibles à l'homme devient alors possible. Ces différents usages peuvent inclure l'étude ergonomique d'un poste de travail, le démantèlement d'une installation complexe, l'accessibilité, la maintenabilité ou « l'inspectabilité » d'un équipement.

Notons aussi que son utilisation réduit significativement le maquetage physique, ce qui représente un gain en termes de temps et de coûts. La réalité virtuelle modifie également les modes de collaboration. Elle améliore la communication avec toutes les parties prenantes : elle permet de bien visualiser les solutions proposées, de faciliter les échanges et d'accélérer les phases de conception.

L'interaction physique avec le monde virtuel est la prochaine étape importante. Les accessoires (bras robotisés, gants, etc.) permettant d'interagir physiquement devraient arriver prochainement sur le marché et contribueront à améliorer l'utilisation de ces technologies. De plus, combiner l'utilisation de la réalité virtuelle avec des équipements physiques améliorent la simulation : on parle alors de réalité mixte.

L'utilisation de prototypes virtuels pour optimiser le design et les opérations d'ingénierie devient

3. Product Lifecycle Management

4. International Thermonuclear Experimental Reactor ou réacteur thermonucléaire expérimental international

5. Conception Assistée par Ordinateur

donc plus commune quelque soit les échelles concernées. Ces approches utilisent souvent la puissance des outils de réalité virtuelle pour réaliser des designs interactifs [35]. Citons quelques exemples dans le domaine nucléaire :

- une approche interactive pour déterminer et optimiser le design d'un système télé-opéré pour FAST (Fusion Advanced Studies Torus) [36],
- la conception de systèmes autonomes pour la maintenance et le démantèlement,
- le développement de programmes à grande échelle pour simuler le fonctionnement des réacteurs à eau légère (programme DOE CASL) [37],
- le développement de la plateforme multimodale EVOC (Enhanced Virtual Open Core) proposée à l'INSTN du CEA de Saclay pour former "les pilotes de réacteurs" à l'aide d'une immersion grandeur nature.

2.1.3 La simulation numérique

Le comportement statistique d'une population stationnaire de neutrons dans le coeur d'un réacteur peut être décrit par l'équation du transport de Boltzmann. Cette dernière ne pouvant être résolue analytiquement, des méthodes numériques ont été développées. Etant donné la taille et la structure très hétérogène des coeurs de réacteurs, des millions de mailles spatiales et angulaires sont nécessaires pour représenter correctement la trajectoire des neutrons. A ceci s'ajoute la discrétisation en énergie afin de représenter finement le caractère résonant des sections efficaces d'interaction des neutrons [38].

La méthode Monte Carlo peut être utilisée pour résoudre l'équation de Boltzmann sans approximation. Elle nécessite cependant un temps de calcul très élevée et n'est donc utilisée que pour les calculs de référence.

Les outils logiciels standard actuellement utilisés remontent aux développements scientifiques des années 1980 au cours desquelles la base des outils et procédures de simulation pour la physique des réacteurs et la gestion du combustible a été construite par le développement de méthodes nodales [39], de codes de réseaux à 2D pour les applications industrielles [40], de procédures d'homogénéisation [41] et de techniques de reconstruction par aiguille [42]. Les schémas de calcul ont été mis à jour par des générations de scientifiques : méthodes de transport sur réseaux, techniques d'homogénéisation, ... Toutefois le schéma en 2 étapes qui consiste en un calcul réseau destiné à produire quelques ensembles de sections efficaces homogénéisées pour la simulation du calcul coeur d'un réacteur est toujours un standard de l'industrie [38, 43].

La gestion du combustible dans un réacteur à eau légère est l'application la plus importante de la modélisation et de la simulation dans l'exploitation d'un réacteur moderne, ce processus étant répété chaque année, lorsque de nouveaux assemblages de combustible doivent être introduits dans le coeur et que la sécurité opérationnelle du réacteur avec la nouvelle charge de base, doit être démontrée aux Autorités de Sécurité. Le processus [44] (voir figure2.1) commence par un calcul en réseau pour déterminer le comportement à la combustion et l'état de chaque assemblage de combustible qui seront utilisés dans le nouveau chargement du coeur. Cependant cette information est souvent disponible à partir de la dernière gestion du combustible du dernier cycle. Les calculs sont nécessaires pour déterminer l'ensemble des sections transversales condensées et homogénéisées. Les matrices de section transverses doivent généralement être organisées pour former la sortie du code de réseaux à 2D nécessaires au calcul coeur 3D. Sur la base des ensembles de sections transverses et des assemblages combustible disponibles (neufs ou usés) un premier agencement de coeur est déterminé en entrée pour le calcul coeur. Sur cette base, une procédure d'optimisation est lancée

(procédure de code interne ou manipulé par l'utilisateur évaluant la durée de cycle pouvant être atteinte avec les assemblages combustible fournis et le schéma de chargement du coeur). Les historiques de puissance sont ensuite extraits pour l'analyse de la performance du combustible. La carte de puissance des assemblages de combustible est extraite du calcul de réseau de l'assemblage combustibles respectif (avec condition aux limites de réflexion) et superposée à la distribution de puissance de la simulation du coeur. L'analyse des transitoires est généralement exécutée sur des paramètres homogènes sans retour détaillé au niveau des aiguilles et sous-canaux.

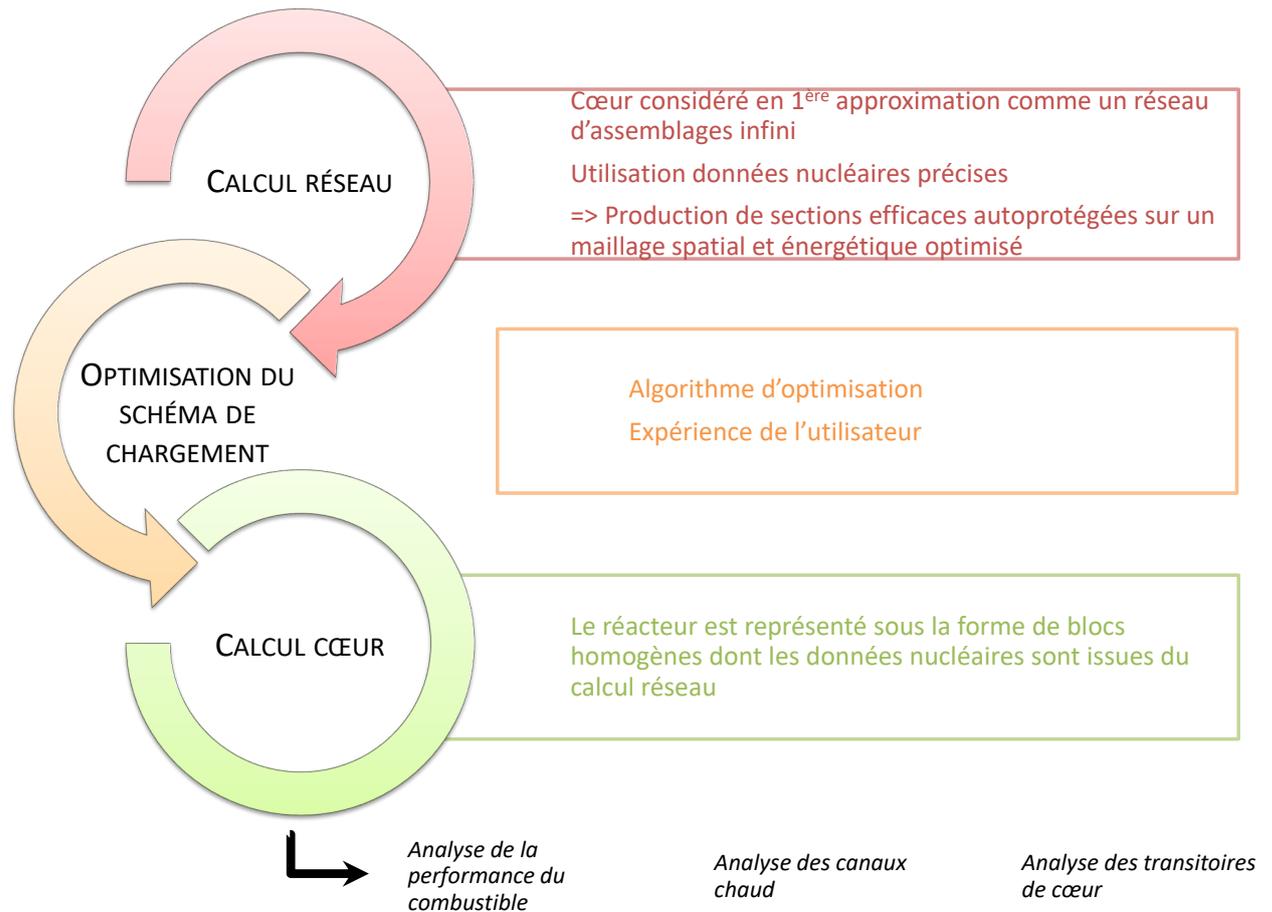


FIGURE 2.1 – Schéma de calcul en 2 étapes utilisé pour la gestion du combustible dans un réacteur à eau légère.

2.2 Plateformes numériques pour le nucléaire

Le développement de logiciels n'est plus aujourd'hui qu'une partie du travail de nombreux scientifiques et ingénieurs [44]. L'exigence excessive n'est plus seulement de nature technique. La réponse à la question "How good is good enough" dépend de la personne interrogée : utilisateur industriel, inspecteur de la sûreté, physicien des réacteurs, public devant être convaincu de la gestion adéquate de la production d'électricité. Il en découle les besoins suivants pour le nucléaire du futur :

- Besoin d'une main d'oeuvre hautement qualifiée pour les centrales de nouvelle génération et maintien efficace des compétences (experts qualifiés et expérimentés) dans la conception de réacteurs nucléaires.
- Besoin de processus d'assurance qualité mis à jour pour surmonter les problèmes de conception trop conservatrice afin d'améliorer les performances économiques sans créer de préjudice sur la sûreté.
- Besoin d'une architecture système permettant le couplage de codes et facilitant le transfert "haute fidélité" d'informations entre les fonctions de l'ensemble du système réacteur. Ce couplage doit s'étendre à l'échelle atomique pour certains composants du système (coeur du réacteur).
- Besoin d'un outil numérique intégré ergonomique permettant un couplage des codes dans un environnement convivial afin de réduire ou d'éviter l'intervention de l'utilisateur sur des détails spécifiques et permettant de ce fait d'aplanir la courbe d'apprentissage des nouveaux spécialistes et de réduire les erreurs humaines.

Les développeurs ont donc besoin de spécifications techniques claires pour pouvoir développer les outils numériques du futur. La qualité de la réponse dépend donc de l'importance de la quantité considérée pour l'application visée.

Dans un tel contexte, la mise en place de plateformes numériques collaboratives pourrait permettre « d'accélérer les temps d'innovation tout en assurant la continuité numérique des données utilisées pour un projet. C'est un aspect organisationnel qu'il ne faut pas minimiser, surtout lorsque de nombreux acteurs interviennent dans un projet complexe et qu'il faut assurer une parfaite gestion des interfaces. » [35]. Le numérique insuffle également la culture de *test and learn*. Comme son nom l'indique, cette méthode permet de tester un produit à petite échelle et de l'optimiser avant son introduction sur le marché.

Dans [35] un environnement numérique décrivant le cycle de vie d'une infrastructure nucléaire est proposé. Il est construit selon 5 branches représentant les 5 étapes du cycle de vie "idéal" d'une infrastructure nucléaire :

- (i) Phase de conception et de construction
Un prototype virtuel de l'installation correspondant au modèle informatique de l'installation est utilisé pour simuler ses performances. Les modèles de calcul associés doivent être validés pour établir dans quelle mesure ils représentent le monde réel par rapport aux utilisations auxquelles ils sont destinés (processus de VVQI⁶). Le transfert de données mesurées lors de tests physiques réels constitue le premier lien entre monde réel et numérique.
- (ii) Phase d'exploitation
Un jumeau numérique de l'unité d'exploitation est créé à partir du prototype en le combinant avec les données BIM [45]. Les données BIM intègrent les déviations entre les spécifications du design et les données réelles recueillies lors de la construction de l'usine ou appliquées retrospectivement à une installation. La connexion au monde réel est assurée par la saisie de données de surveillance (dosimétrie, suivi de l'état des structures, résultats d'inspection obtenus au cours de maintenances, CND⁷). Le jumeau numérique est donc composé de modèles CAO combinés avec des bases de données issues de mesures.
- (iii) Phase de fin de vie

6. Validation - Vérification - Quantification des Incertitudes

7. Contrôle Non Destructif

Les modèles CAO et les bases de données de la phase d'exploitation représentent une description complète et historique de la centrale. Ces données peuvent être utilisés pour son démantèlement à l'aide d'outils de réalité virtuelle. Les inspections réelles de la centrale en fin de vie peuvent fournir des informations supplémentaires pour le *replica* numérique et permettre la validation de l'état de certaines parties inaccessibles de la centrale.

- (iv) Phase de stockage des déchets
Après le démantèlement les déchets nucléaires sont immobilisés et emballés en vue de leur stockage intermédiaire. Dans l'environnement numérique, un formulaire de déchet numérique équivalent peut être créé sous la forme d'un modèle informatique du colis de déchets utilisant les données transférées à partir de la réplique de déclassement. Les données de caractérisation régulièrement collectées à partir de colis de déchets peuvent être ajoutées afin de maintenir un modèle numérique haute fidélité pouvant être utilisé pour l'élimination finale.
- (v) Phase d'élimination des déchets
Tout comme leur homologues réels, les données décrivant les déchets nucléaires éliminés doivent être conservées sur une longue période. Un suivi continu de la surveillance *in situ* des déchets du monde réel est toujours nécessaire.

Bien qu'une plateforme totalement intégrée de ce type ne soit pas encore d'actualité dans le domaine du nucléaire, des répliques correspondant à une étape en particulier trouvent leur place.

Dans le domaine du démantèlement le concept de réplique n'est pas nouveau. Mais le concept de plateforme intégrée oriente les études vers une continuité de la représentation virtuelle du prototype (*via* le jumelage numérique) jusqu'à la réplique de démantèlement : ce processus offre un certain nombre d'avantages en termes de fidélité de la simulation susceptibles d'améliorer la sécurité, la mise en oeuvre et la rentabilité des processus de démantèlement [46].

2.3 L'apport du numérique dans les activités de démantèlement

Les exigences dans le domaine du démantèlement des installations nucléaires diffèrent en fonction du contexte de leur initialisation. Cependant, la question principale reste toujours la même : comment optimiser le projet c'est-à-dire comment obtenir un maximum de sûreté en respectant les exigences réglementaires et en minimisant le temps et les coûts ?

Plusieurs travaux de recherche [46, 47] ont mis en avant le fait que les outils numériques actuels (simulation 3D, réalité virtuelle, interface utilisateur avancée, ...) pouvaient être utilisés pour :

- mieux maîtriser l'état initial des installations et gérer leur configuration dans le temps ;
- soutenir la performance économique et technique des projets de démantèlement tout en limitant les risques et en respectant les exigences de sûreté ;
- construire un référentiel commun transverse et partageable par l'ensemble des parties prenantes ;
- et participer à la structuration de la filière.

Le démantèlement est donc une filière du secteur nucléaire en construction qui a pu bénéficier des derniers développements de la technologie numérique puisque soumise différemment aux contraintes des Autorités de Sûreté d'une installation en exploitation.

Un projet de démantèlement peut être décomposé en 5 étapes : (i) évaluation de l'état initial,

(ii) mise en place d'un scénario, (iii) préparation de l'équipe, (iv) mise en oeuvre du scénario, (v) évaluation, sauvegarde et transfert de l'expérience. Chacune de ces étapes est développée ci-dessous. La mise en place d'outils numériques dans chacune de ces étapes est illustrée par des exemples académiques et/ou industriels trouvés dans la littérature.

2.3.1 Evaluation de l'état initial

Le coût total d'un projet de démantèlement, les risques et le niveau de sûreté associés, les équipements et les ressources dépendent principalement de la caractérisation radiologique de l'état initial du site à démanteler. La caractérisation radiologique initiale consiste à rassembler le plus de données possible et à les utiliser de la façon la plus efficace afin que ces données puissent constituer un outil d'aide à la décision pendant le développement du scénario de démantèlement le plus approprié. Le moyen habituel pour déterminer cette caractérisation radiologique est de réaliser des mesures et des échantillonnages de façon intensive et non exhaustive ce qui conduit à un investissement financier considérable et à une prise de risque non négligeable pour les opérateurs réalisant ces mesures. Cependant, un sondage insuffisant ou imprécis peut également conduire à des délais et des coûts non anticipés. Afin d'optimiser cette étape de mesures il est possible de tirer avantage de données disponibles par ailleurs, telles que celles provenant de la phase d'opérations de l'installation, de modélisations [48, 49, 50, 51, 52] ou d'analyses statistiques et/ou géostatistiques, de mesures ou de données historiques (projet INSIDER - Horizon 2020). Des retours d'expérience d'autres projets de démantèlement peuvent également compléter la base de données dans la mesure où les résultats sont extrapolables. Choisir un schéma itératif entre les données disponibles (historique de l'installation et calculs) et les mesures permet également une optimisation de l'échantillonnage expérimental et donc du coût associé. La base de données menant à la caractérisation radiologique initiale de l'installation peut donc être vaste et la gestion et l'analyse de ces données peuvent se révéler complexes. Pour analyser efficacement ces données, Szoke et al [46] ont développé un prototype d'outil numérique d'aide à la décision permettant d'exploiter efficacement les données de la phase d'exploitation (données dosimétriques du personnel, données de maintenance,...) mais également les données pré-opération du site telles que la radioactivité naturelle. Il permet également la mise en place de "bonnes pratiques" telles que l'enregistrement et la vérification de données en fonction d'un objectif donné, la planification et le stockage des échantillons et des mesures et l'extraction efficace de données pour une analyse ultérieure (éventuellement statistique). Au final, cette technologie présente un grand potentiel pour améliorer la caractérisation des sites en fournissant rapidement, efficacement et de façon ergonomique une identification de la contamination, une quantification et une classification des matériaux et structures activés. De plus, la technologie mobile combinée à ce prototype rend les fonctionnalités de cet outil disponible *in situ* pour les opérateurs intervenant sur le terrain.

2.3.2 Mise en place d'un scénario

Différentes étapes doivent être suivies pour mettre en place un scénario (estimation des risques, options disponibles, planification des tâches, composition des équipes et ressources nécessaire et communication aux Autorités de Sûreté) mais la plus importante reste l'estimation des risques (nucléaires et autres) pour les opérateurs. Une installation en cours de démantèlement est en effet soumise à de nombreux changements modifiant l'environnement radiologique ce qui rend délicat, dans cette phase, l'évaluation des conditions d'exposition des travailleurs.

Pour optimiser l'efficacité des opérateurs lors d'un projet de démantèlement, Jeong et al [47] ont

développé une maquette numérique analysant différents scénarios de démantèlement possibles. Les différentes fonctions de ce prototype sont :

- une simulation cinématique modélisant et évaluant le démontage des structures et le mouvement des parties qui en découlent,
- une simulation humaine modélisant la posture et le comportement des opérateurs,
- une évaluation et une optimisation du scénario en terme d'efficacité.

Thompson et McCann ont exploré l'utilisation de la simulation d'événements discrets pour améliorer les opérations de démantèlement [53]. En modélisant un système en détail, on peut mieux le comprendre et cerner les éventuelles possibilités pour améliorer le déroulement des opérations.

Bien qu'efficaces ces prototypes ne prennent pas en compte l'environnement radiologique dans lequel les opérateurs doivent évoluer.

Des logiciels capables à la fois d'estimer le débit de dose et les coûts associés ont été mis au point, la radioprotection des travailleurs entraînant des coûts financiers et de sûreté considérables. Un système de soutien technique (DEXUS pour Decommissioning Engineering Support System) a été développé, par exemple, pour créer un plan de démantèlement en quantifiant les déchets radioactifs, en visualisant l'inventaire radioactif, en simulant le plan de démantèlement et en évaluant la charge de travail dans les environnements radiologiques [54].

NARVEOS, un produit industriel produit par Euriware, fournit diverses fonctions telles que l'estimation du débit de dose, les fonctions robotiques, les fonctions de support de script de scénario et les interfaces utilisateurs associées [55, 56].

De nouveaux outils numériques basés sur la simulation de processus de coupe de composants radioactifs sont actuellement développés sur l'estimation des débits de dose lors de ces opérations. Par exemple, [57] ont proposé une méthodologie pour simuler le processus de coupe sur une plateforme numérique permettant une planification flexible du scénario de démantèlement.

Szoke et *al* [46] ont étudié comment les technologies actuelles et émergentes peuvent être appliquées pour améliorer les stratégies internationales de déclassement à l'aide des logiciel Halder Planner [46] et VRdose [58]. Cet outil permet le calcul en ligne de la dose personnelle et collective. Le scénario peut être modifier de façon dynamique et différents scénarii peuvent être comparés sur la base d'une approche multi-critères.

2.3.3 Préparation de l'équipe

Les opérateurs intervenant sur les sites en démantèlement peuvent avoir plusieurs origines :

- ils peuvent avoir été opérateurs dans l'exploitation actuellement en cours de démantèlement ; même s'ils connaissent l'installation, ils doivent se familiariser à de nouveaux outils et protocoles ainsi qu'à un nouvel environnement radiologique et physique en constant changement ;
- ils peuvent être spécialisés dans le domaine du démantèlement mais doivent se familiariser avec l'installation en cours de démantèlement et son historique ; il faut également qu'ils puissent maintenir leur compétences dans un environnement sûr ;
- ils peuvent être nouvellement embauchés dans la filière nucléaire et avoir besoin d'être sensibilisés à tous les aspects de radioprotection rencontrés dans le domaine du démantèlement.

Lorsqu'on apprend de nouvelles informations, l'utilisation de la réalité virtuelle peut avoir un impact cognitif important, améliorant la quantité d'informations conservée par rapport à l'apprentissage traditionnel en classe. Il a été démontré que la formation dans des environnements virtuels améliore la conscience contextuelle du travailleur quant à l'endroit où il se trouve et aux processus qui

s'y déroulent. Cette sensibilisation accrue peut améliorer la sécurité et réduire la fréquence des accidents. Elle permet la mise en situation des opérateurs dans des configurations critiques et/ou d'urgence sans les mettre en danger [46]. Elle améliore donc la sûreté des opérations, et ce, à moindre coût puisqu'elle ne nécessite pas la fabrication de maquettes vouées à la destruction.

2.3.4 Mise en oeuvre du scénario et des travaux

Une installation nucléaire en démantèlement est en constant changement et de nombreux protocoles sont donc définis en fonction de l'environnement radiologique à un instant donné. Cette quantité d'informations peut conduire à des erreurs humaines sur le terrain. Il est donc important de pouvoir avoir à sa disposition un outil capable de suivre l'environnement radiologique "en direct" et de mettre à jour les conditions radiologiques du scénario choisi. Si cet outil est de plus doté de la technologie mobile, il peut améliorer la communication entre les opérateurs, éviter les erreurs de protocole et optimiser le travail en équipe [46].

2.3.5 Evaluation, sauvegarde et transfert de l'expérience

Dans ce domaine les outils numériques sont un formidable outil de "retour sur expérience". Les simulations et données collectées fournissent une documentation compréhensive des activités réalisées sur le chantier procurant à la communauté une base d'apprentissage en terme d'organisation et de sûreté pour les futurs projets de démantèlement. Elles constituent également une large base de données pouvant être utilisées pour produire des estimations plus précises des coûts engendrés par de tels projets. Finalement ces nouveaux outils pourraient permettre d'optimiser et de standardiser les opérations mises en oeuvre sur les chantiers de démantèlement.

2.4 Contributions dans le domaine nucléaire

La durée de vie d'une centrale nucléaire est limitée, une centaine d'années au total, dont environ 40 années dédiées à l'exploitation, 20 années de transition et de préparation au démantèlement puis 40 années nécessaires au démantèlement et à l'assainissement de l'installation et du site. Différents facteurs doivent être maîtrisés tout au long de cette vie afin de permettre un fonctionnement sûr du réacteur. Le débit de dose au sein de l'installation dû à la source primaire et/ou aux structures activées constitue un des facteurs à optimiser dès la conception, le but étant de déterminer les conditions radiologiques de fonctionnement des appareils électroniques et d'intervention des opérateurs au cours de l'exploitation mais également de limiter les déchets radioactifs en fin de vie du réacteur. En fonction de l'étape de la vie du réacteur différentes méthodologies sont disponibles pour estimer le débit de dose :

- Lors de l'étape de conception, le débit de dose à l'arrêt (SSDR pour Shut Down Dose Rate) induit par l'activation des neutrons est un des facteurs à estimer et à optimiser en ajustant le design du réacteur. C'est l'une des tâches de sûreté majeure puisqu'elle permet de garantir le respect des limites de dose dans le cadre de la planification des opérations de maintenance à venir lors de la phase d'exploitation. Plusieurs méthodes de calcul 3D sont actuellement en cours de développement :
 - La méthode D1S (Direct One Step) [59, 60] repose sur l'hypothèse que les gammas de désintégration des nucléides radioactifs sont rapidement émis et que par conséquent les gammas et neutrons de désintégration sont transportés *via* une seule simulation Monte

Carlo. Des facteurs de correction temporels (calculés par un code d'inventaire) sont nécessaires pour prendre en compte le temps de désintégration de chaque radionucléide.

- La méthode Rigorous 2 Step (R2S) [60, 61, 62, 63] associe le transport de rayonnements d'une simulation Monte Carlo à l'analyse d'activation d'un code d'inventaire par l'utilisation d'un maillage commun. Elle comprend 3 étapes : le transport des neutrons par le code Monte Carlo, la calcul de la source gamma de désintégration par le code d'activation, le transport des gammas de désintégration par le code Monte Carlo.

Au cours de cette phase les géométries utilisées pour réaliser les calculs sont basées sur les modèles CAO des futurs réacteurs. Des méthodes pour convertir les données CAO en données lisibles par les codes Monte Carlo sont en cours de développement [64, 65].

- Lors de l'étape de démantèlement, les données issues de la phase d'exploitation sont recueillies puis utilisées pour générer un modèle "moyen" représentatif de la vie du réacteur. Etant donné l'âge des installations actuellement en démantèlement les données disponibles sont plutôt au format papier. Mais à l'avenir des données au format numérique pourraient faciliter la collecte des données dans la mesure où une maintenance du format des données est assurée. En fonction des besoins, plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour estimer le débit de dose à cette étape :
 - L'estimation des sources gammas de désintégration est souvent effectué sur la base de calculs et de mesures. Le calcul est effectué en 3 étapes (calcul coeur pour obtenir les sources de fission, transport des neutrons pour estimer le flux sur les structures d'intérêt, calcul d'activation pour obtenir les sources gamma). Moyennant un temps de simulation relativement long, le calcul fournit une carte exhaustive du débit de dose mais ne permet pas de déterminer les points de contamination. Une validation et un ajustement du modèle à l'aide de mesures est donc nécessaire.
 - La mise en place d'un scénario de démantèlement résulte d'un schéma itératif au cours duquel le débit de dose au niveau des zones d'intervention est estimé pour différentes configurations possibles. Le but lors de cette étape est principalement de déterminer le type de protection nécessaire, l'intervention ou non de moyens téléopérés, la mise en place d'un zonage opérationnel, etc... Un tel schéma nécessite donc un outil rapide de calcul du débit de dose. Des méthodes simplifiées sont alors utilisée [66, 67].
 - Une fois le schéma optimal obtenu, une estimation plus précise du débit de dose peut être réalisé à l'aide d'un schéma plus précis.

Sur la figure 2.2 sont indiquées les étapes majeurs de la vie d'un réacteur avec un focus sur la partie démantèlement. Sont présentées ci-dessous mes contributions dans le domaine de la radioprotection adaptée aux réacteurs nucléaires au sein du Service de Physique des Réacteurs et du Cycle (SPRC) du CEA de Cadarache depuis Juin 2016.

Contrairement aux activités que j'ai menées dans le domaine médical, le financement des études dont j'ai la charge est assuré par le biais de projets internes au CEA, basés sur des collaborations inter ou intra directionnelles. Je détaille dans la première section de cette partie, les actions dont j'ai eu la gestion ainsi que les nouvelles collaborations que j'ai cherchées à monter en répondant à des appels à projet internes CEA. Malgré ma mutation dans une autre direction, j'ai eu la chance de pouvoir poursuivre mes activités d'enseigneemnt et d'en commencer de nouvelles. Ces interventions sont détaillées dans la seconde section de cette partie. Dans une dernière partie, je mentionne l'ensemble des études et développements menés dans le domaine du nucléaire depuis 2016.

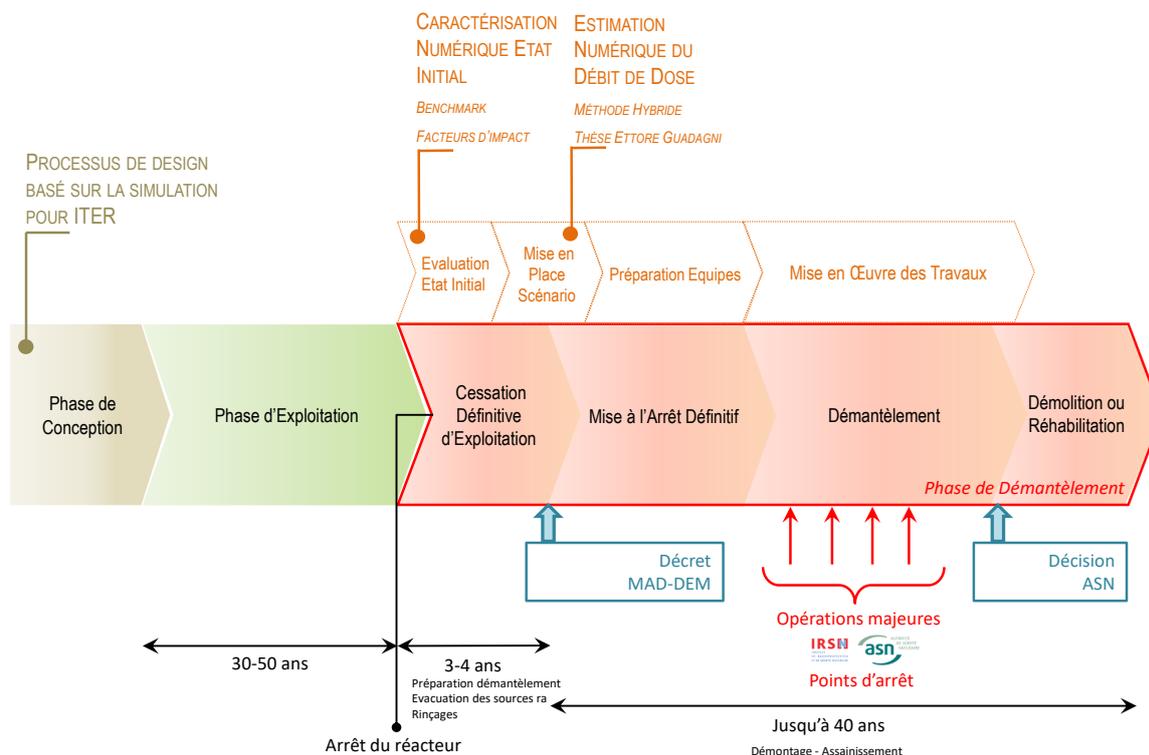


FIGURE 2.2 – Etapes majeures de la vie d'un réacteur. L'étape de démantèlement est détaillée : sont mis en avant les aspects réglementaires ainsi que les étapes plus fonctionnelles liées aux activités du démantèlement.

2.4.1 Montage et gestion de projets dans le domaine nucléaire

Le changement de direction opérationnelle lors de ma mutation en 2016 m'a conduit à modifier mon organisation de travail. La Direction des EnergieS travaille en mode projet avec livraison, au mois annuelle, de notes techniques devant répondre à des normes de qualité spécifiques impliquant la relecture des documents, non seulement par les responsables hiérarchiques, mais également par des collègues apportant un regard critique sur le travail et l'analyse effectués.

Certains projets doivent également faire appel à des compétences hors CEA. Pour cela, des prestations sont mises en place avec des entreprises extérieures. Dans le cadre du projet concernant le démantèlement de réacteurs du centre du CEA de Cadarache, j'ai eu à gérer la rédaction du cahier des charges ainsi que le suivi de la prestation qui en a découlé avec la société ASSYSTEM.

Depuis 2019, j'ai également répondu à certains appels à projet internes listés ci-dessous :

- en 2019, proposition d'un sujet de thèse au projet incitatif FOCUS dédié au domaine de l'assainissement et du démantèlement (FOCUSDEM), dont l'objectif principal était l'émergence d'innovations de rupture dans le domaine de l'A&D à horizon de dix ans ;
- en 2021, proposition de deux projets d'une durée de un an chacun au Programme Transversal de Compétences "Simulation Numérique" :
 - le projet AVALON (Monte Carlo based Virtual reALity for dOse estimation in dis-

maNtling) proposé en collaboration avec deux autres directions du CEA et dans lequel nous proposons de combiner la précision des simulations Monte Carlo et la dynamique des plateformes de réalité étendue en changeant le paradigme calculatoire utilisé jusqu'à présent dans ces plateformes,

- le projet MODDIS (MOdelling for Design and DISmantling) est également proposé avec deux autres directions du CEA dans le but de mettre au point une méthodologie de calcul efficace mêlant codes stochastique et déterministe pour accompagner le design des aimants supraconducteurs des bobines de champs toroïdal dans le domaine de la fusion et l'optimisation des opérations de démantèlement dans le domaine de la fission et de la fusion.

Les lettres d'intention ont été acceptées pour ces deux projets. Les projets détaillés sont actuellement en phase d'évaluation.

2.4.2 Activités d'encadrement, d'enseignement et d'expertise depuis 2016

Malgré ma mutation et le changement de thématique qui en a découlé, j'ai pu continuer à intervenir dans le domaine de l'enseignement et de l'encadrement d'étudiants :

- en poursuivant mes interventions, en *solo* mon ancienne collègue du CEA de Saclay ayant décidé de stopper sa participation, à l'université de Rennes sur "les applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" dans le Master 2 de Physique Médicale ;
- en intervenant dans le module "Radioactivité" du BTS Contrôle des rayonnements ionisants et application des techniques (CRIATP) de l'INSTN de Cadarache,
- en encadrant des étudiants de master2 lors de leur période d'alternance ou de leur stage de fin d'études,
- en encadrant Ettore Guadagni en doctorat sur le "Développement d'une approche de simulation hybride pour les calculs de dose dans les activités de démantèlement" depuis Janvier 2019.

Dans le cadre de mes activités sur les outils de calcul dédiés au démantèlement des réacteurs, je participe au groupe de travail interne CEA "Instrumentation et Mesure pour l'Assainissement Démantèlement" (GT-IMAD). Ce GT a été créé suite aux recommandations émises à l'issue d'un séminaire organisé par le CEA Cadarache en 2016. Le but ultime de ce GT est de proposer un projet de R&D collaboratif et transdisciplinaire s'appuyant sur les principaux points durs et verrous technologiques dans le contrôle et la caractérisation des opérations et des déchets de l'assainissement-démantèlement. Cet objectif a conduit à la proposition d'un laboratoire interdisciplinaire nommé LIMPID2 (Laboratoire Interdisciplinaire de Mesure Polyvalent *In-situ* pour le Démantèlement/assainissement et la caractérisation de Déchets) dont l'avant-projet sommaire est en cours de rédaction.

De part mon expertise dans le domaine des outils de calcul dédiés aux activités médicales et aux activités d'A&D, je participe au comité scientifique de la conférence ANIMMA 2021.

2.4.3 Activités scientifiques dans le domaine nucléaire

Les études que j'ai eues à mener depuis 2016 ainsi que les développements associés sont présentés dans cette section de manière synthétique. Les contributions les plus pertinentes sont, quant à elles,

développées dans des chapitres spécifiques du manuscrit.

Processus de design basé sur la simulation pour ITER

La construction de maquettes d'essais physiques, en particulier dans ITER, peut être très coûteuse en raison de la grande échelle et de la complexité des installations. Des maquettes numériques et des tests virtuels sont donc largement utilisés tout au long du processus de conception et de planification des opérations des équipements de manutention à distance.

La télémanipulation a un rôle essentiel à jouer dans ITER. Au début de l'exploitation nucléaire, il sera impossible d'apporter des changements, d'effectuer des inspections ou de réparer des composants dans les zones activées de la machine autrement qu'en les manipulant à distance. Les composants nécessitant un entretien ou un remplacement seront enlevés par le système de manipulation de la hotte de transfert et du bouchon (CPRHS pour Cask Plug Remote Handling System) puis transférés dans le bâtiment des cellules chaudes où un ensemble d'outils multifonctionnels seront en place pour effectuer les opérations de manutention, de coupe et de soudage requises.

Dans le cadre des SSA⁸ 57 et 61, j'ai travaillé sur l'analyse des modes de défaillance de la hotte de transfert. Parmi les risques identifiés, l'un d'entre eux est spécifique à la neutronique et a fait l'objet d'une étude que j'ai menée en collaboration avec mon collègue, Yannick Pénéliou. Pendant l'exploitation, les composants face au plasma seront fortement activés par les neutrons et/ou contaminés par le tritium. A l'arrêt du plasma, la poussière (due à l'érosion des composants) activée sera enlevée de l'enceinte à vide mais il en restera en faible quantité. Le CPRHS peut donc être contaminé par ces poussières activées lors du transport de composants entre l'enceinte à vide et les cellules chaudes. Le CPRHS n'ayant pas de protection biologique, ces poussières résiduelles activées peuvent par conséquent induire un débit de dose résiduel autour du système.

Pour estimer le risque d'exposition externe dans le cas d'opérateurs de maintenance intervenant à l'intérieur ou à proximité de la hotte de transfert, j'ai réalisé des estimations de débit de dose dans et autour du CPRHS pour différentes configurations correspondant à différents scénarios de contamination par les poussières activées. Yannick Pénéliou a converti la maquette de la hotte de transfert (au format CAO) en un modèle lisible pour une simulation Monte Carlo *via* un processus impliquant plusieurs étapes de simplification. Puis j'ai utilisé ce modèle pour réaliser plusieurs estimations de débit d'équivalent de dose dans et autour du CPRHS. Cette étude et les résultats associés sont détaillés dans le chapitre 6 du manuscrit.

Caractérisation numérique de l'état initial d'un réacteur en démantèlement

L'objectif global de la caractérisation numérique de l'état initial d'un réacteur en démantèlement est l'établissement d'un dossier de connaissances pérenne de l'installation *via* la détermination de son contenu radiologique. La caractérisation de l'activation et l'inventaire en produits d'activation des structures internes suite à l'irradiation sous flux neutronique des aciers constituant les principaux composants de ces structures permet en effet de :

- guider l'exploitant à entreprendre les actions de démantèlement en priorisant les actions à mener,
- soutenir l'exploitant dans la démonstration de sûreté nucléaire de l'installation

Pour mener à bien les études associées à cette thématique, je développe des schémas (stochastiques et déterministes) faisant partie intégrante du formulaire DEMAIN (DEMantèlement et Assainisse-

8. Site Support Agreement

ment des Installations Nucléaires). Ce formulaire s'inscrit dans la démarche de l'ASN (arrêté INB 2012) sur les outils de calcul scientifique (OCS). Il permet de réaliser la caractérisation radiologique préliminaire des structures et/ou combustibles d'une Installation Nucléaire de Base (INB et INBS) en vue de son démantèlement. Le formulaire est composé de 4 principales étapes : (i) calcul coeur, (ii) transport des neutrons, (iii) évolution isotopique, (iv) transport des photons. A l'aide d'une connaissance fine des géométries, compositions (dont impuretés) et historique d'irradiation, une modélisation complète du réacteur est réalisée pour estimer les niveaux d'activation des structures ainsi que les débits de dose associés (si nécessaire). Il permet donc d'obtenir *in fine* une classification des déchets et constitue un outil d'aide à la décision pour la définition du ou des scénario(s) de démantèlement optimum(s) en termes de radioprotection. Afin de pouvoir mettre en relation les estimations issues des schémas du formulaire avec des mesures *in situ*, puis de déterminer les éventuels écarts calculs-mesures, j'ai réalisé des développements et des études pour quantifier les incertitudes, biais et sensibilités à certaines données d'entrée du formulaire. Ces travaux sont détaillés dans la suite du manuscrit et illustrés par des articles publiés en revue.

Estimation numérique du débit de dose d'un réacteur en démantèlement

Lors du démantèlement d'installations nucléaires, le niveau du débit de dose doit être estimé à l'aide d'outils de calcul vérifiés, validés et qualifiés afin d'être en mesure de planifier le scénario de démantèlement le plus optimisé en terme de radioprotection. Il existe aujourd'hui deux méthodes classiques pour estimer le débit de dose : les méthodes Monte Carlo, précises mais nécessitant de longues heures de calcul, et la technique du noyau ponctuel (ou PKI pour Point Kernel Integration), moins précise mais beaucoup plus rapide. Depuis mon arrivée en 2016 au SPRC, j'ai travaillé sur des méthodologies permettant soit d'accélérer les simulations Monte Carlo, soit de rendre plus précises les méthodes de type PKI.

- Développement de modèles de sources virtuelles

Afin de rendre les méthodes PKI plus précises dans les configurations complexes présentant de nombreuses réflexions par exemple, il est possible de créer un modèle de sources virtuelles (MSV) basé sur des calculs Monte Carlo. Classiquement, un modèle de source peut être obtenu en caractérisant cette dernière de façon analytique. Il est cependant difficile de représenter les corrélations entre les différents paramètres caractérisant les particules : énergie, position, direction de propagation, poids, Une caractérisation fine d'une source peut également être obtenue en utilisant une SMC complète des particules et en générant un espace des phases (PSFmc) au cours de la simulation. Dans les applications médicales, cette méthode est largement utilisée pour caractériser les faisceaux des LINACs en radiothérapie [68] et des TDM en imagerie [69]. Dans les études dédiées aux réacteurs, cette fonctionnalité est plutôt déclinée pour les études de conception des détecteurs. Néanmoins, récemment, l'équipe d'UNED [70] a également utilisé cette méthode pour caractériser de façon synthétique la source de neutrons provenant du tokamak d'ITER et pour faciliter la détermination de l'ambiance radiologique après la protection biologique.

Un PSFmc contient des données spécifiques aux particules suivies, ces paramètres étant différents en fonction du code considéré. Cette distribution précise des particules peut être considérée comme un terme source pour une SMC. Bien que la plupart des codes MC soit dotée de cette fonction, cette solution n'est pas toujours la meilleure :

- L'utilisation directe du PSFmc est dédiée au système modélisé initialement et ne permet pas d'ajuster les paramètres pour un autre système de la même nature ; on ne peut pas

utiliser un PSFmc généré sur un LINAC/réacteur donné pour un autre LINAC/réacteur de la même série.

- L'utilisation directe d'un PSFmc peut également conduire à l'introduction d'une erreur systématique dénommée "variance latente ou rémanente" [70, 71]. Cette erreur systématique apparaît lorsque le PSFmc est rejoué plusieurs fois : le PSFmc ayant une taille finie, la variance associée à son utilisation l'est également et une meilleure convergence ne peut pas être obtenue en simulant davantage d'histoires.

Pour surmonter ces limites, il est possible de créer un modèle basé sur des histogrammes obtenus en analysant les données du PSFmc. En échantillonnant les paramètres initiaux des particules dans ces distributions, chaque particule est unique ce qui conduit à une réduction de la variance latente. L'ajustement de telles sources "virtuelles" a déjà été démontrée dans [72] pour des applications médicales. De telles sources sont également très performantes pour reproduire de façon précise et synthétique le streaming des particules, dans la mesure où les corrélations entre les variables des particules sont bien reproduites par le modèle [70].

Je travaille sur la possibilité de transposer cette méthodologie largement utilisée en radiothérapie dans le domaine des réacteurs. A ce jour, deux alternants ont travaillé sur la mise en place de MSV⁹ dédiée aux réacteurs.

Nathan Hernandez (2017-2018) a développé un MSV basé sur les PSFmc générés par TRIPOLI-4®[73] représentant les paramètres des particules émises par un coeur de réacteur. Il a, en particulier, pris en compte la corrélation entre la position et l'énergie des particules. Son travail a fait l'objet d'une communication soumise à l'ICRS¹⁰2020¹¹.

Gaël Lemaniry (2019-2020) s'est, de son côté, focalisé sur le développement d'une MSV basée sur les fichiers de points de collision généré par TRIPOLI-4®. En effet, les PSFmc générés par TRIPOLI-4® ne fournissant pas d'informations sur les collisions des particules, il est nécessaire d'utiliser une autre fonctionnalité de TRIPOLI-4® pour obtenir ces informations. Le but de son travail a été de permettre d'étendre le domaine de validité d'outils déterministes, tels que NARMER [66] utilisés dans le domaine de l'A&D pour estimer des DED¹². Dans des configurations complexes, telles que celles d'un "bunker", il est en effet difficile pour un code déterministe de reproduire fidèlement les différents types d'interaction. L'atténuation des particules peut être simulée à l'aide des facteurs de build-up et la réflexion des particules sur les parois à l'aide d'albedos. Cependant, quand ces interactions sont concomitantes, ces codes arrivent aux limites de leur validité. L'objectif de l'alternance de Gaël Lemaniry a donc été :

- de générer plusieurs sous-sources, chaque sous-source correspondant aux derniers lieux de collision des particules,
- de caractériser chaque sous-source à l'aide d'histogrammes,
- d'introduire ces histogrammes dans une bibliothèque dynamique pouvant être lue lors de l'exécution de TRIPOLI-4® *via* le module EXTERNAL_SOURCE.

Sur la figure 2.3 est représentée la configuration étudiée, les 7 sous-sources obtenues et les histogrammes 1D obtenus pour l'écran de protection.

9. Modèle de Source Virtuelle

10. International Conference on Radiation Shielding

11. Avec la crise sanitaire du Covid-19, cette conférence a été reportée en 2021 puis finalement annulée

12. Débit d'Equivalent de Dose

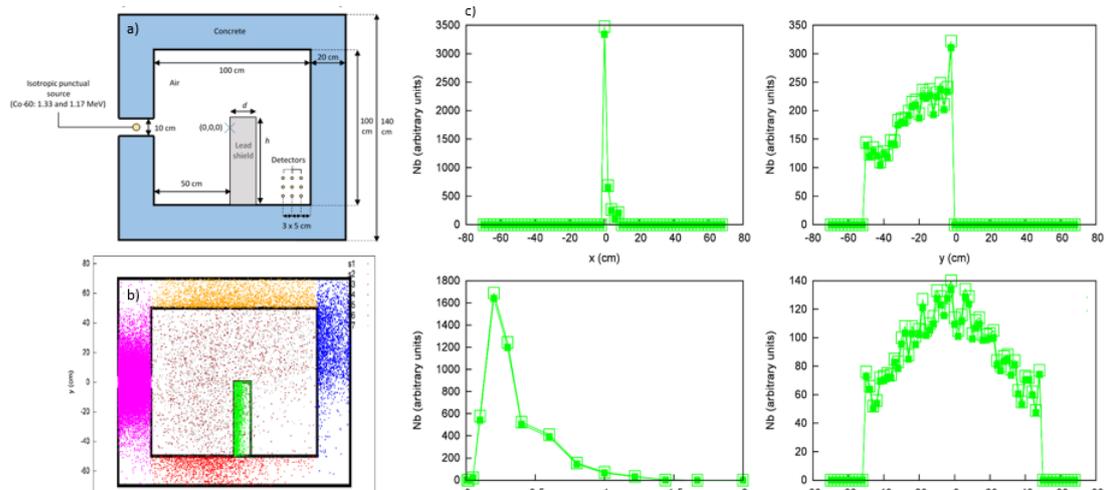


FIGURE 2.3 – Configuration du bunker (a), sous-sources du modèle de sources virtuelles (MSV) (b) et histogrammes pour la sous-source 7 correspondant à l'écran (c)

Une première validation du modèle a été réalisée en comparant les résultats obtenus avec une SMC analogue et le MSV. Pour les 9 détecteurs considérés ici, des déviations inférieures à 3.06% ont été observées. Ce niveau de variation peut être explicitée par la précision avec laquelle le modèle a été généré. C'est pourquoi à l'avenir une propagation des incertitudes associées à la génération du MSV devra être implémentée. Néanmoins, ce modèle permet de déterminer la contribution de chaque sous-source au DED final, facteur d'intérêt pour savoir où positionner les écrans. Ainsi, dans le cas considéré ici, la sous-source bleue correspondant au mur latéral droit contribue à 30% du DED total.

Un nouvel alternant en 2021-2022 poursuivra ces développements en introduisant ce modèle de sources virtuelle dans un code déterministe de type NARMER et en comparant les résultats obtenus lorsque seule la source initiale est modélisée.

- Implémentation d'un nouvel estimateur dans TRIPOLI-4®

Il existe déjà de nombreuses solutions pour accélérer la convergence des SMC, en particulier à l'aide de techniques de réduction de la variance (VRT) ([74]). Ces techniques consistent à modifier la procédure "naturelle" d'échantillonnage pour se concentrer sur les particules "les plus importantes", soit celles contribuant le plus au score recherché ([75]). Parallèlement à ces VRT, il est également possible d'optimiser l'efficacité d'une SMC en choisissant l'estimateur le plus approprié ([76]). L'estimateur "de base" dans toute SMC est l'estimateur dit "de collision", qui estime un score dans un volume en dénombrant le nombre d'interactions dans ce volume et en le divisant par la section efficace macroscopique. De par sa nature, cet estimateur est inefficace et produit des résultats entaché d'une variance élevée dans les régions à faible densité, où le nombre d'interactions est moindre, ainsi que dans les zones lacunaires. Une autre classe d'estimateurs, appelés "estimateurs de trace" ou TLE pour Track Length Estimator, peuvent résoudre ce problème. Les TLEs sont basés sur l'équivalence entre fluence de particules et longueur total du parcours des particules par unité de volume ([77]). Ainsi chaque trajectoire de particule traversant le volume de détection contribue au score ce qui conduit à un gain en efficacité de la SMC. La version linéaire de cet estimateur, dénommé linear TLE ou TLE, est largement utilisé dans les codes MC ([78]) et a montré de bonnes performances dans

différents domaines ([79]). A partir de la formulation classique du TLE linéaire, un estimateur plus complexe peut être dérivé de façon analytique : il s'agit de l'estimateur exponentiel de longueur de trace ou e TLE. La principale différence entre la version linéaire et exponentielle du TLE est que le e TLE remplace une décision stochastique, *i.e.* le vol libre de la particule, par son résultat attendu caractérisé par le coefficient d'atténuation. Un tel remplacement d'une décision aléatoire par son résultat attendu est une VRT fréquemment utilisée ([80]. Avec le e TLE, après chaque collision, la particule est transportée de façon analytique en ligne droite jusqu'à la fin de la simulation, tout en étant atténuée de façon exponentielle.

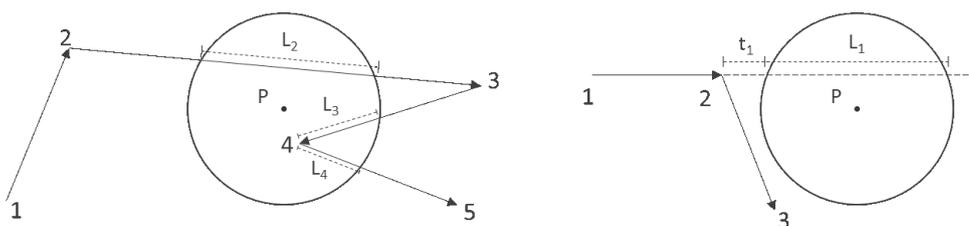


FIGURE 2.4 – Représentation 2D de a) l'estimateur de trace linéaire (TLE), et b) l'estimateur exponentiel de trace (e -TLE)

Cette méthodologie a été très vite mise en oeuvre dans le domaine de l'imagerie X [23, 81] où la diffusion dans l'objet/patient considéré contamine la détection du signal et conduit à un flou dans l'image. La méthode a été adaptée à la dosimétrie patient [24, 82]. La détection forcée, implémentée pour la détection des particules dans chaque pixel du détecteur en imagerie, a été abandonnée au profit d'une génération plus physique des particules secondaires. Ces dernières sont en effet produites par le module MC à l'aide des sections efficaces différentielles habituelles et un splitting est utilisé pour augmenter le nombre de particules secondaires. Ces particules secondaires sont ensuite suivies de façon déterministe. Cette technique connue sous le nom de *se_TLE* montre de bons résultats.

Une méthodologie similaire a été développée dans le domaine nucléaire par Sweezy [83] avec MonteRay. Il a développé un estimateur appelé Volumetric Ray Casting qui fonctionne comme celui de Smekens et al, à la différence que la partie déterministe est implémentée sur GPU¹³. L'introduction d'un transport déterministe des particules secondaires ayant prouvé son efficacité pour des milieux peu denses, j'ai proposé de développer une méthode similaire dans le contexte de l'A&D, afin en particulier de répondre à la problématique du streaming des particules. Ce travail font donc l'objet de la thèse d'Ettore Guadagni, qui implémente actuellement cette méthode dans le code MC du CEA, TRIPOLI-4®. Ce travail fait l'objet d'un focus particulier dans l'un des chapitres du manuscrit.

13. Graphics Processing Unit

Les centrales nucléaires sont des systèmes complexes dont le cycle de vie dépasse la durée de vie professionnelle des ingénieurs et scientifiques responsables de leur conception, fonctionnement et démantèlement. Ainsi la mise en place d'un environnement numérique nucléaire intégré fournit un moyen de connaissances et de transfert aux générations successives d'ingénieurs et de scientifiques.

Un certain nombre de lacunes technologiques importantes doivent être comblées avant la mise en oeuvre industrielle de telles plateformes. Dans ce document nous nous concentrerons sur les outils dédiés à la conception du réacteur ITER et au démantèlement des installations, et tout particulièrement à la partie modélisation des processus physiques conduisant à l'activation et donc à l'ambiance radiologique de ces installations. Bien que ces phases de vie d'un réacteur semblent s'opposer du point de vue temporel, les exigences réglementaires font qu'aujourd'hui elles nécessitent des études de radioprotection similaires et font donc appel aux mêmes outils de modélisation, et en particulier à la technique Monte Carlo.

Chapitre 3

La simulation Monte Carlo pour la médecine et les réacteurs

La complexité d'un système est caractérisé par deux facteurs : le nombre d'éléments qui le constitue d'une part et le nombre des interrelations d'autre part. A ceci s'ajoutent des facteurs techniques tels que la présence de l'humain, l'implémentation de phénomènes aléatoires, l'utilisation de sous-systèmes et l'évolution rapide des spécifications.

Les interactions rayonnements-matière et la neutronique sont par nature des phénomènes complexes, de par la prise en compte de phénomènes stochastiques et la dépendance entre les particules détectées et les particules incidentes.

- Dans le milieu médical cette complexité est amplifiée par la spécificité des machines mises en jeu, les différents interlocuteurs (physiciens, médecins, manipulateurs radio, dosimétristes) et le workflow associé au patient.
- Dans le milieu nucléaire cette complexité est également amplifiée par les caractéristiques des réacteurs, les différents facteurs physiques mis en jeu lors de la production d'électricité et les différentes spécialités (thermodynamique, neutronique, mécanique,...) et donc, les différents intervenants issus de disciplines diverses mais complémentaires.

Dans ces deux domaines s'ajoute la complexité liée aux exigences réglementaires à suivre pour faire fonctionner les machines avec le maximum de sûreté pour les personnes impliquées (travailleurs, patients, ...) et le public.

Un système complexe est bien plus que le regroupement de composants et de procédés. L'analyser par décomposition successives ne le simplifie pas forcément en raison des interrelations qui peuvent exister entre les différents composants. Pour s'assurer de la maîtrise d'un tel système, il faut aller plus loin en construisant une abstraction, le modèle [84].

3.1 Modélisation et simulation

3.1.1 La simulation

Un **modèle** est une construction théorique (physique ou mathématique) d'un système qui est caractérisé par les composants le constituant, la relation entre ces composants, l'environnement, les contraintes qu'il subit et son évolution dans le temps. Un modèle est implémenté de façon dynamique dans une **simulation**. Le processus complet de simulation comprend trois grandes étapes :

- La conception et le développement du modèle sont essentiels : de la qualité du modèle dépendra les résultats.
- L'exécution du modèle , qui peut demander un temps de calcul considérable.
- L'analyse des résultats issus de l'exécution n'est pas toujours évidente et peut prendre des semaines de travail pour en tirer les résultats escomptés.

En pratique, une simulation requiert les éléments suivants (figure 3.1) :

- Le **modèle du système simulé** est plus ou moins raffiné en fonction des résultats attendu. Il peut comprendre une composante humaine modélisée.
- Les **paramètres du modèle**.
- Le **modèle de l'environnement**.
- Le **moteur de la simulation** gère les évolutions du système.
- Le **scénario** décrit la situation initiale du système et les événements prévisibles pouvant survenir au cours du temps.

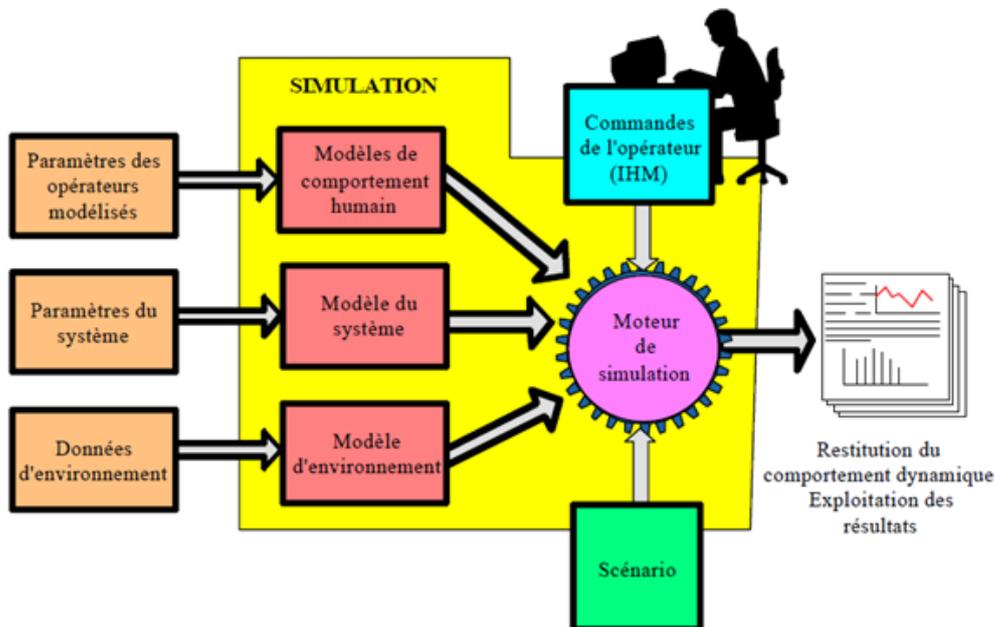


FIGURE 3.1 – Composants d'une simulation.

Sur la figure 3.2, nous avons décliné les éléments nécessaires à une simulation pour :

- une planification de la dose en radiothérapie,

- l'estimation de l'activation des structures et des débits de dose dans le cadre du démantèlement d'un réacteur.

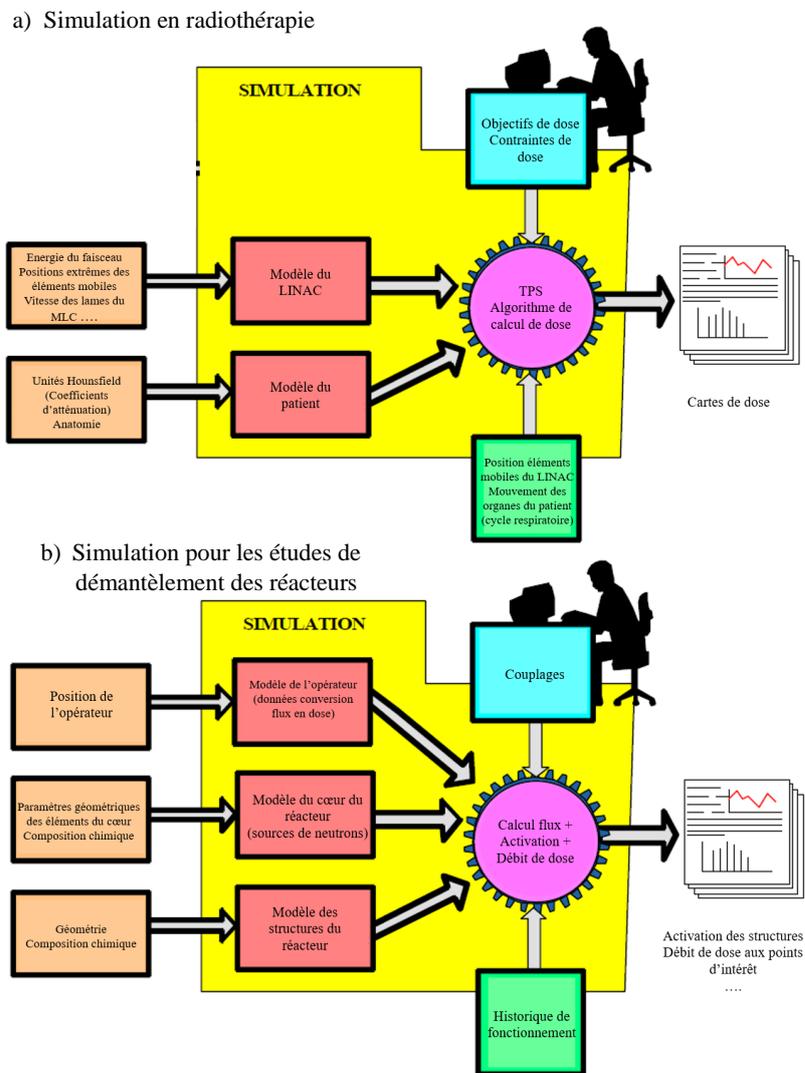


FIGURE 3.2 – Eléments d'une simulation en radiothérapie (a) et dans le cadre du démantèlement d'un réacteur (b).

Depuis le développement des codes de calcul scientifique pour l'analyse et la prévision de phénomènes réels associés à un domaine d'application, les résultats obtenus par les simulations numériques ont toujours été validés par comparaison aux résultats expérimentaux ou analytiques quand ceux-ci étaient disponibles. Une démarche plus rigoureuse entreprise depuis plusieurs années consiste à affiner cette confrontation directe par une approche de Vérification, Validation et Quantification des Incertitudes (VVQI).

3.1.2 Le processus VVQI

L'objectif de la VVQI est de séparer dans l'observation des écarts aux données expérimentales trois niveaux d'erreurs possibles par l'application méthodique de trois processus :

- La **Vérification** est un processus visant à montrer que l'implémentation d'un modèle (son codage informatique) correspond bien à la description conceptuelle et aux spécifications du système modélisé. Elle porte sur les méthodes numériques et les algorithmes, leur implémentation, les diagrammes de flux de données, l'architecture des programmes informatiques ainsi que le respect des règles de programmation. La vérification porte également sur la conception et la mise en oeuvre de liens et d'interfaces entre des outils de calcul partageant des flux de données.
- La **Validation** permet d'analyser les capacités du modèle mathématique ou physique à représenter correctement la réalité, en précisant ce que l'on appelle réalité car les données expérimentales peuvent elles-mêmes être affectées par des erreurs de mesure. Ce processus permet de déterminer à quel degré un modèle est une représentation exacte du monde réel pour un emploi donné.
- La **Quantification des Incertitudes** est le processus qui identifie et mesure la gamme de variation des résultats issus du modèle caractérisant les valeurs possibles et contenant vraisemblablement la valeur réelle de la réponse cible considérée, soit l'incertitude. Ces incertitudes sont introduites dans le processus de simulation et ne sont généralement pas modélisées de façon déterministe mais probabiliste. Dans ce contexte, on peut distinguer au moins deux types d'incertitudes :
 - les incertitudes opérationnelles représentant les incertitudes sur des quantités associées à des conditions aux limites,
 - les incertitudes de modèle associées aux paramètres apparaissant dans ces modèles.

Dans la mesure du possible, la quantification des incertitudes est réalisée en confrontant les résultats issus de la simulation à des données expérimentales dont les paramètres et conditions de mesure sont bien connus et maîtrisés. Si de telles comparaisons ne sont pas possibles, des comparaisons avec d'autres outils de calcul ayant déjà été certifiés ou des études de sensibilités peuvent être menées.

Cet ensemble de procédures et de méthodes permettent de **certifier que le modèle ou la simulation est conforme** à ce qui était attendu. A la suite de cette procédure, une certification garantissant l'adéquation du modèle pour une utilisation donnée peut être fournie. Cette certification est un **label** qui n'est valable que pour un emploi donné du modèle ou de la simulation.

3.1.2.1 Déclinaison dans le domaine nucléaire

Cette procédure est principalement déclinée dans le domaine nucléaire où des **formulaires de calcul** (ou OCS¹) sont mis en place pour répondre aux besoins des industriels. Un formulaire de calcul est un ensemble cohérent associant :

- des codes de simulation
- Par exemple :

1. Outil de Calcul Scientifique permettant la simulation numérique de phénomènes physiques ; ils sont composés d'un ou plusieurs solveurs et éventuellement de pré- et post-processeurs

- CRONOS2-ERANOS pour étudier de façon déterministe la physique des coeurs dans les réacteurs thermiques ou rapides,
- TRIPOLI-4® pour le transport stochastique des particules,
- PEPIN2/MENDEL/CESAR pour le calcul des paramètres du cycle,
- des bibliothèques de données nucléaires (JEFF3.1.1),
- des schémas de calcul spécifiques avec des recommandations spécifiques,
- les incertitudes associées aux paramètres d'intérêt.

Un formulaire regroupe, en général, deux schémas de calcul :

- un schéma dit "de référence", constitué d'OCS dont les performances prédictives sont jugées les plus représentatives de la réalité ;
- un schéma dit "industriel" constitué d'OCS plus adaptés aux contraintes des études menées lors de processus d'industrialisation (conception de nouveaux designs, étude paramétrique, ...)

La figure 3.3 représente de façon schématique ce qu'est un formulaire et le processus de VVQI qui lui est associé. Le formulaire représenté est composé : (i) de données technologiques permettant la description géométrique et physique des objets à simuler, (ii) de données nucléaires, (iii) de deux schémas de calcul, eux-même composés d'OCS. Chacun des schémas fournit un résultat de calcul, C_{ref} pour le schéma de référence et C pour le schéma industriel. Une fois la première étape du processus VVQI réalisée, soit la vérification de chacun des schémas, l'étape de validation peut être mise en oeuvre. Dans le domaine nucléaire, elle se fait préférentiellement en deux étapes :

- lors de la Validation Numérique (ou VAN), les résultats obtenus par les deux schémas sont comparés afin de déterminer les biais de modélisation b introduits par le schéma déterministe ;
- la Validation Expérimentale (ou VAE) conduit à estimer les incertitudes introduites par le schéma industriel en comparant des données expérimentales E tabulées dans une base de données aux résultats de calcul C obtenus dans les mêmes conditions ;
- lors de la dernière étape, soit la quantification des biais et incertitudes, l'accès aux sources de ces incertitudes est obtenu *via* des méthodes de propagation des incertitudes des données d'entrée (en particulier pour les données nucléaires) ou des études d'impact et/ou de sensibilité (en particulier pour les données technologiques).

Dans le domaine de la physique des réacteurs et du cycle, les schémas de référence sont basés sur la simulation Monte Carlo qui permet le suivi pas à pas de chacune des particules, alors que les schémas industriels sont basés sur des OCS déterministes plus rapides. Du point de vue réglementaire, ces formulaires de calcul se doivent d'être produits au travers de processus cohérents avec les exigences de l'arrêté INB du 7 février 2012 [85] :

ARTICLE 3.8

I. La démonstration de sûreté nucléaire s'appuie sur :

- des méthodes appropriées, explicitées et validées, intégrant des hypothèses et des règles adaptées aux incertitudes et aux limites des connaissances des phénomènes mis en jeu ;
- des outils de calcul et de modélisation qualifiés pour les domaines dans lesquels ils sont utilisés

II. L'exploitant précise et justifie ses critères de validation des méthodes, de qualification des outils de calcul et de modélisation et d'appréciation des résultats des études réalisées pour démontrer la sûreté nucléaire.

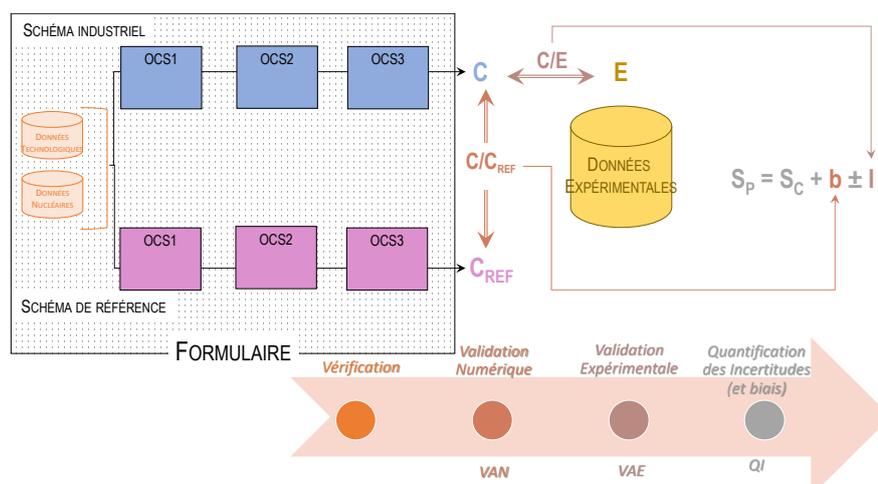


FIGURE 3.3 – Contenu d'un formulaire de calcul dans le domaine de la physique des réacteurs et du cycle et déclinaison du processus de VVQI associé

3.1.2.2 VVQI dans le domaine médical

Dans le domaine de la physique médicale, le processus de VVQI n'est pas décliné en tant que tel. Les médecins travaillant dans le domaine de la radiothérapie sont cependant particulièrement sensibles aux différentes causes d'incertitudes inhérentes à leur spécialité. En effet, la planification et la délivrance de la dose en radiothérapie fait face à plusieurs sources d'incertitude (voir figures 3.4, 3.5 et 3.6 dont les données sont issues de [86] et [87]). Si on reprend le parcours-patient tel que présenté sur la figure 1.2, nous pouvons lister les différentes sources d'incertitude voire d'erreur de la façon suivante :

- incertitudes lors de l'acquisition des données anatomiques du patient
 - Le positionnement du patient est une étape cruciale dans le processus de radiothérapie puisqu'il influence la balistique d'irradiation. Il est cependant difficile de reproduire la position exacte du patient d'une séance de radiothérapie à l'autre. Afin de faciliter cette étape et de diminuer les incertitudes de repositionnement du patient différentes méthodes ont été mises en place :
 1. le TDM de Simulation Virtuelle et le LINAC ont le même isocentre². La position de l'isocentre est visualisable à l'aide de lasers positionnés dans la salle de Simulation Virtuelle et de traitement. Le réglage des lasers est contrôlé régulièrement afin d'éviter toute dérive géométrique dans la planification et le traitement.
 2. Des systèmes de contention et des "tatouages" sont également utilisés pour permettre un repositionnement précis du patient.
 3. A ces dispositifs externes s'ajoutent des dispositifs "internes" permettant de contrôler le repositionnement du patient. Des marqueurs peuvent être implantés pour aider au repositionnement (par exemple clips pour le cancer du sein) et l'imagerie embarquée permet de comparer et contrôler la position de certains repères anatomiques (les os en général) entre les images de planification et les images de traitement. Pour

². point fixe correspondant à l'entrecroisement de l'axe de rotation du bras et de l'axe du faisceau, directement lié à la géométrie de l'appareil

éviter l'irradiation trop importante des patients par les techniques d'imagerie embarquée traditionnelles (imagerie portale et CBCT) des machines hybrides IRM-LINAC ont vu le jour.

- La définition des volumes d'intérêt (volume cible et organes à risque) hérite des incertitudes associées aux techniques d'imagerie utilisées pour obtenir les informations anatomiques voire fonctionnelles du patient c'est-à-dire : résolution spatiale, visualisation d'une tumeur de substitution mais non des cellules tumorales en tant que telles, pathologies microscopiques non visibles. De ce fait, la forme et la localisation de la tumeur sont entâchées d'une incertitude prise en compte par le biais de marges (CTV³-PTV⁴) permettant de traiter correctement la tumeur. Les modifications inter-fraction de la tumeur (évolution de la taille et de la forme de la tumeur en cours de traitement) peuvent aujourd'hui être prises en compte en adaptant le plan de traitement lorsque de grosses variations ont été observées à l'aide de l'imagerie embarquée. Les mouvements intra-fraction (cycles respiratoire et cardiaque, ...) peuvent être pris en compte en asservissant la délivrance du faisceau.
- L'inhomogénéité présente dans le corps du patient (tissus, poumon, prothèses éventuelles) pose encore problème.
- Les incertitudes associées à la planification de la dose tendent à diminuer avec le développement de la puissance des ordinateurs. Les algorithmes de dose actuellement disponibles en clinique sont dotés d'outils d'optimisation permettant une escalade de la dose à la tumeur tout en préservant les tissus sains. Néanmoins les données faisceaux et les modèles de calcul implémentés dans ces outils de calcul se doivent d'être vérifiés régulièrement afin d'assurer la dose délivrée au patient. Actuellement lorsqu'un nouveau TPS est livré dans un service, différentes étapes doivent être suivies pour adapter les paramètres du logiciel à l'accélérateur du service et pour qualifier le logiciel (commissioning, recette, contrôles qualité réguliers).
- Les incertitudes associées à la délivrance du traitement proviennent de dérives dans l'étalonnage de la machine et/ou d'erreurs dans les paramètres de traitement. Afin de maîtriser cette première source d'incertitudes, un contrôle qualité régulier de l'accélérateur est mis en place. La seconde source d'incertitude, voire d'erreur, est aujourd'hui contrôlée à l'aide du système de Record and Verify (R&V) qui réalise informatiquement le transfert du plan de traitement des stations de dosimétrie aux stations de traitement. De plus les paramètres délivrés lors du traitement sont enregistrés dans des fichiers "log" permettant ainsi une vérification *a posteriori* de la séance.

Depuis des décennies ces incertitudes sont contrôlées via l'utilisation de marges. Ainsi le volume cible clinique (CTV) contouré par le médecin est traditionnellement étendu à un volume cible de planification plus grand dénommé PTV. Cependant ce concept de PTV présente plusieurs limites. Dans certaines situations, le PTV ne garantit pas une couverture du CTV, quelle que soit la marge géométrique choisie ; dans d'autres situations, un PTV suffisamment grand assure cette couverture, mais au détriment d'OARs situés à proximité. Récemment des méthodes d'optimisation probabilistes robustes ont été investiguées afin d'incorporer le mouvement et l'incertitude associée dans les outils d'optimisation des plans de traitement [88].

3. Clinical Tumor Volume - volume cible anatomo-clinique, extensions microscopiques de la tumeur

4. Planning Tumor Volume - obtenu par l'addition d'une marge autour du CTV, il comprend : (i) l'ITV : Internal Target Volume, prise en considération du mouvement des organes et (ii) le SM : Set-up Margin, incertitude de repositionnement à chaque séance de radiothérapie

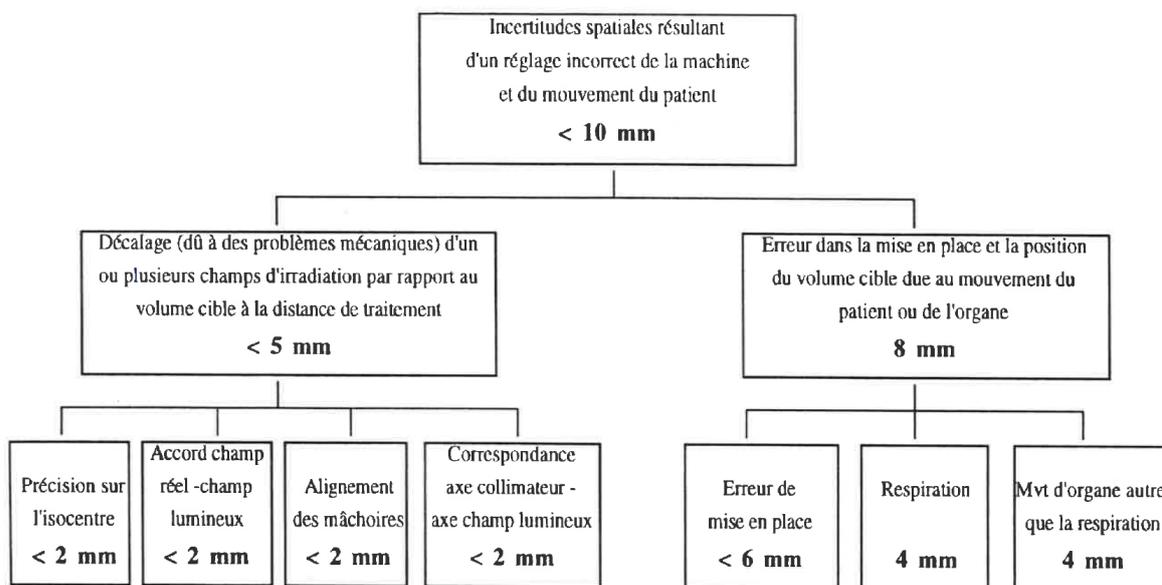


FIGURE 3.4 – Incertitudes géométriques observées en radiothérapie

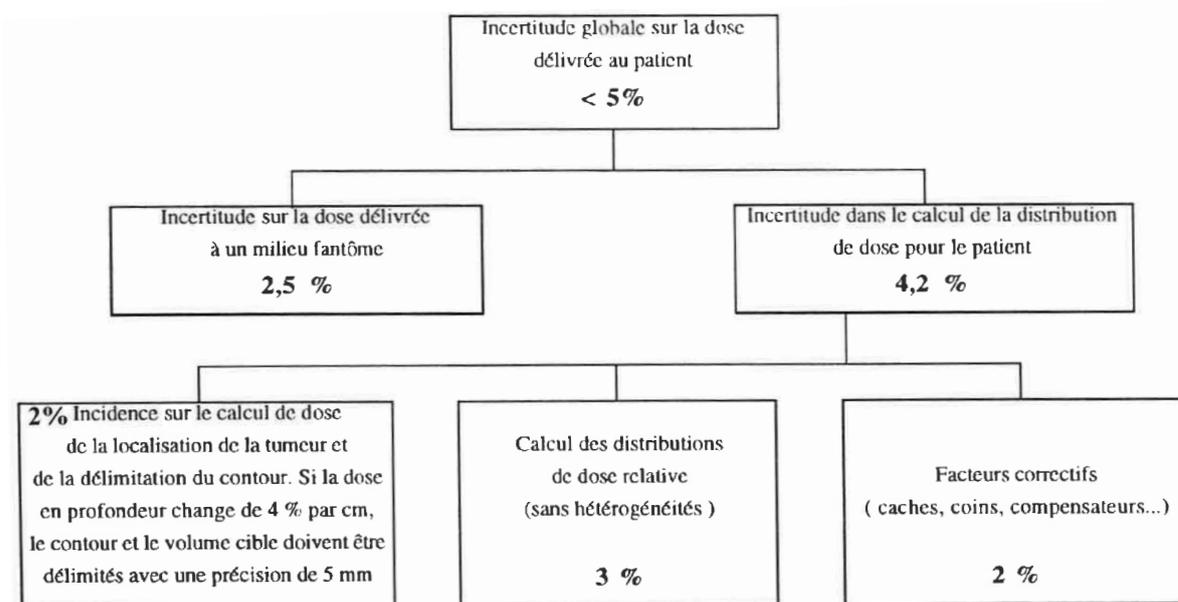


FIGURE 3.5 – Incertitudes sur la dose en radiothérapie

3.1.3 Les modèles

Le meilleur modèle est celui qui reflète le mieux les aspects du système réel que l'on veut étudier, compte-tenu du besoin et des contraintes de moyens et de délais de développement.

Un modèle est dit *déterministe* lorsque, pour une entrée donnée, les résultats sont toujours identiques. On définira de même un système déterministe comme étant un système dont l'évolution est prévisible : à partir d'un état *Si*, pour des conditions données, il évoluera nécessairement vers l'état

Etape du processus de détermination de la dose	100 x $\Delta D(1g)/D$	
	Techniques présentes	Techniques futures
Détermination de la dose absolue au point d'étalonnage	2,0	1,0
Autres points de mesure : incertitude additionnelle	1,1	0,5
Stabilité du moniteur	1,0	0,5
Homogénéité du faisceau	1,5	0,8
Incertitudes sur les données du patient	1,5	1,0
Calcul de la dose	3,0	1,0
Mise en place du faisceau et du patient	2,5	1,6
Incertitude globale	5,1	2,6

FIGURE 3.6 – Incertitudes souhaitables en radiothérapie

S_j (voir figure 3.7). La modélisation déterministe permet donc de modéliser, répliquer, dupliquer un comportement ou des propriétés. Basée sur des modèles mathématiques des composants et sur une résolution exacte ou numérique des équations, c'est la simulation la plus souvent rencontrée en physique et ingénierie.

Un modèle est dit *stochastique* ou aléatoire lorsque ses résultats sont apparemment déterminés par une ou plusieurs variables aléatoires qui représentent un processus incertain. Un système stochastique dans un état initial S_i évoluera, pour des conditions données, de plusieurs façons différentes (voir figure 3.7).

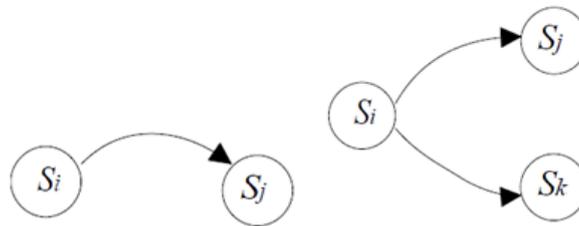


FIGURE 3.7 – Evolution de l'état d'un système déterministe (à gauche) ou stochastique (à droite)

3.2 La Simulation Monte Carlo

La simulation Monte Carlo (SMC) est une méthode visant à calculer une valeur numérique et utilisant des processus aléatoires. Elle utilise des échantillonnages aléatoires répétés pour explorer les résultats.

Le pré-requis le plus important pour la SMC est le générateur de nombres pseudo-aléatoires. C'est un code capable de produire une séquence de nombres, dont on ne peut pas facilement déduire des propriétés déterministes, de façon à ce que cette séquence puisse être appelée *suite de nombres aléatoires*.

L'objectif de la simulation Monte Carlo consiste à respecter la réalité physique, tant pour ce qui concerne la géométrie du problème que les interactions au niveau nucléaire ou atomique. Ainsi, l'utilisation de la méthode Monte Carlo appliquée à la simulation du transport des particules consiste à suivre individuellement les particules depuis leur naissance (les sources) jusqu'à leur disparition

(par absorption ou fuite du système étudié) : lorsqu'une particule traverse un matériau, elle interagit par collisions avec les atomes de ce milieu. Cette simulation est effectuée par « paquets » (appelés *batchs*) de particules (quelques milliers à quelques centaines de milliers) afin de calculer des moyennes permettant d'obtenir une estimation des grandeurs d'intérêt.

Pour réaliser une SMC dans le domaine nucléaire et médical, différentes étapes sont nécessaires :

- modéliser la géométrie du problème,
- modéliser la source des particules,
- modéliser les interactions particules-matière,
- stocker les résultats.

Chacune de ces étapes est développée dans la suite et illustrer par une application dans le domaine nucléaire et/ou médical.

3.2.1 Modélisation de la géométrie

Programmer une géométrie n'est pas difficile mais peut s'avérer fastidieux lorsque la géométrie est complexe. Chaque code a une syntaxe spécifique pour le fichier d'entrée que l'utilisateur se doit de maîtriser.

Dans le domaine médical, le module géométrique est utilisé pour modéliser la source des rayonnements mais également le patient.

Depuis les années 1960, la communauté scientifique en radiologie a développé et appliqué les fantômes humains informatiques pour les études de dosimétrie des rayonnements ionisants. Ces modèles sont devenus de plus en plus précis en ce qui concerne la structure interne du corps humain. À mesure que l'informatique évoluait, les fantômes évoluaient. Les fantômes informatiques sont aujourd'hui classés en trois générations en fonction de quand et comment ils ont été introduits [89] :

- **Les fantômes stylisés basés sur des équations quadratiques (1960s-1980s).** En 1969, Snyder et ses collègues ont développé le premier fantôme hétérogène baptisé MIRD-5 (figure 3.8 du fantôme MIRD-5 développé par [90]), adopté par le comité de dosimétrie du rayonnement interne médical (MIRD) de la Société de médecine nucléaire (SNM) [90]. Ce fantôme était composé d'un squelette, d'une paire de poumons et du reste (tissus mous). La représentation des organes internes dans ce fantôme était grossière, ne prenant en compte que la description la plus générale de la position et de la géométrie de l'organe.
- **Les fantômes voxelisés basés sur des images tomographiques (1980s-2000s).** La création d'un fantôme de voxels comporte quatre étapes :
 1. Acquérir un ensemble d'images tomographiques qui couvrent une partie ou idéalement tout le volume du corps.
 2. Identifier les organes ou tissus d'intérêt à partir de l'image d'origine.
 3. Spécifier la densité de l'organe (par exemple, les tissus mous, l'os dur, l'air, etc.) et la composition chimique.
 4. Définir des tranches d'image segmentées dans un volume tridimensionnel (3D) pour la visualisation et les calculs Monte Carlo.

La figure 3.9 illustre ces étapes en utilisant le fantôme VIP-Man [91].

- **Les fantômes BREP (Boundary Representation) basés sur des primitives avancées et déformables (2000s-aujourd'hui).** Ces fantômes contiennent les caractéristiques anatomiques externes et internes d'un corps humain à l'aide de la méthode de représentation

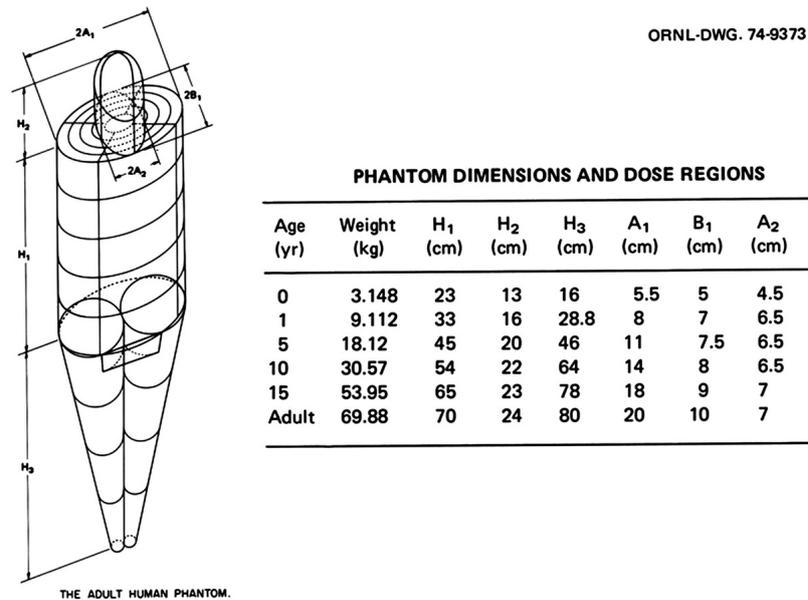


FIGURE 3.8 – Fantôme MIRD-5

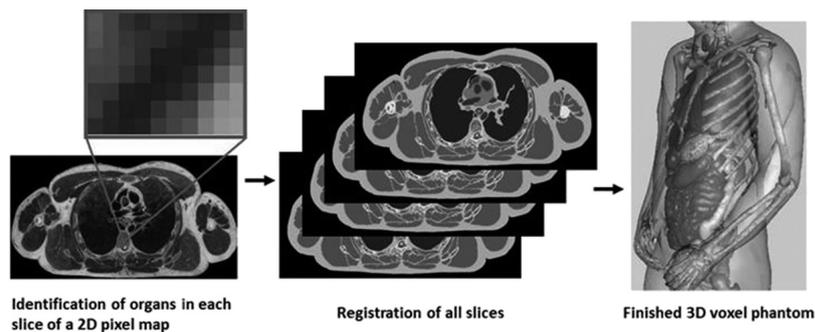


FIGURE 3.9 – Procédure pour créer un fantôme de voxel en utilisant, à titre d'exemple, le jeu de données d'images du cadavre VIP-man

des limites.

Le fantôme NURBS (NonUniform Rational B-Spline) à quatre dimensions (4D) pour le coeur et le torse (NCAT) a été largement utilisé dans la recherche en médecine nucléaire, pour évaluer et améliorer l'imagerie TEP myocardique.

Le fantôme à maillage polygonaux est composé d'un ensemble de sommets, d'arêtes et de faces spécifiant la forme d'un objet polyédrique dans un espace 3D. Les surfaces du fantôme sont définies par une grande quantité de mailles polygonales, le plus souvent des triangles. Le maillage polygonal présente trois avantages remarquables dans le développement de fantômes corps complets. Premièrement, les surfaces maillées illustrant l'anatomie humaine peuvent être facilement obtenues à partir d'images réelles de patients. Deuxièmement, le fantôme à base de maillage polygonal dispose d'une souplesse considérable pour ajuster sa géométrie, ce qui permet de simuler des anatomies très complexes. Troisièmement, de nombreux logiciels commerciaux de conception assistée par ordinateur (CAO), tels que Rhinoceros, AutoCAD et Visualization Toolkit (VTK), fournissent des fonctions intégrées capables de convertir rapidement un maillage polygonal en NURBS.

Sur la figure 3.10 sont résumés ces principaux modèles aujourd'hui disponibles pour modéliser un patient (réel, fantôme et/ou détecteur) ainsi que leurs avantages et inconvénients.

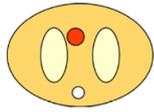
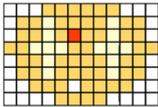
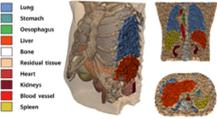
	Description	Avantages	Inconvénients
Analytique	Objets géométriques primitifs 	Navigation + rapide => optimisation de l'efficacité du calcul Modélisation facile des déformations et des mouvements	Modélisation difficile d'un patient réaliste
	 • NURBS : Non-Uniform Rational B-Splines • Primitives allowing for modeling complex curves and 3D surfaces • Easy to parameterized volumes using (affine) transformation applied to control points	Aucun échantillonnage	• Modélisation des variations spatiales de densité impossible • Nécessité de convertir en géométrie voxélisée
Voxélisée		Très réaliste, en partant d'une image CT d'un patient	Temps de calcul important: mise à jour des propriétés des objets à chaque interface
	 Adult Reference Computational Phantoms ICRP PUBLICATION 110 Approved by ICRP in October 2007 and adopted by ICRU in October 2008		• Surfaces en escalier : imprécisions dans le calcul de dose et la simulation d'images à haute résolution • Résolution limitée du voxel complique la modélisation de petits organes sensibles (sphère ORL) • Rigidité du modèle limite la prise en compte des déformations des organes
Mailles tétraédriques	 Maillage tétraédrique	• Déformation des organes possible et facile • Variation spatiale de la densité possible • Simulation + rapide : 4 facettes à tester pour un <u>tétraèdre</u> contre 6 pour un <u>voxel</u> • Génération de géométries à l'aide de fichiers CAO possible	

FIGURE 3.10 – Avantages et inconvénients des types de géométrie utilisés pour modéliser le patient ou le détecteur en médecine

A l'avenir, ces fantômes numériques posséderont également des informations physiologiques et fonctionnelles sur le corps humain au niveau de l'organe et des cellules obtenues à partir d'appareils de radiologie émergents. D'ici 2030, des percées en radiobiologie numérique, dans le contexte de la radiothérapie du cancer et de ses effets radiobiologiques, devraient ouvrir de nouvelles perspectives pour le traitement personnalisé en radiothérapie en comprenant et en exploitant le potentiel considérable des données génomiques.

Passer de fantômes basés sur de simples équations du second degré à des fantômes voxélisés, basés sur des images médicales réelles du corps humain, a été une étape majeure. Les modèles les plus

récents sont basés sur des outils mathématiques plus avancés, telles que la monogline B-spline rationnelle non uniforme (NURBS) et les maillages polygonaux, qui permettent de créer des fantômes 4D mixant espace tridimensionnel et temps. Ces fantômes contiennent des anatomies déformables basées sur la physique et sont donc réalistes du point de vue de la biomécanique pour être utilisés dans le domaine médical mais également dans le secteur nucléaire pour décrire, par exemple, les détails anatomiques d'organes vitaux lors de postures réalistes, différentes de la station au repos habituellement considérée pour de tels fantômes. Ainsi, un nouveau fantôme dénommé CHAD pour Computational Human for Animated Dosimetry a vu le jour [92]. Il est structuré de telle sorte que sa posture puisse être ajustée en conjonction avec les données obtenues à l'aide d'un système de capture de mouvement. Il peut donc permettre la simulation d'un travailleur en mouvement impliqué dans un scénario d'accident nucléaire.

Du point de vue de la géométrie des dispositifs d'irradiation (LINAC, TDM, réacteurs nucléaires), les analystes nucléaires cherchent de plus en plus à utiliser les modèles CAO dans leurs analyses, généralement motivés par la disponibilité de ces modèles techniques et par la volonté d'inclure le plus de détails pertinents dans leur modèle d'analyse afin de mieux refléter la réalité. L'exportation de la conception d'un élément (tête de traitement d'un LINAC [93], géométrie d'ITER [94] et de ses composants [95]) à partir d'un logiciel de CAO dans un format de fichier approprié, qui peut ensuite être importé dans le logiciel de simulation Monte Carlo, minimise les erreurs pouvant être rencontrées lors de l'affectation manuelle des paramètres géométriques dudit élément. Plusieurs approches ont déjà été adoptées [96] pour permettre l'utilisation de modèles CAO dans les simulations MC :

- l'utilisation indirecte de la CAO *via* des approches de traduction

La première méthode est la conversion de la géométrie CAO en géométrie Monte Carlo en utilisant des logiciels de conversion tels que McCad développé par KIT [97] ou SuperMC [64]. Cette approche prend la géométrie CAO telle qu'elle est produite et la décompose en objets primitifs à géométrie solide combinatoire (plans, boîtes, sphères, cônes et surfaces jusqu'au 2e ordre). Cette approche pose toutefois des problèmes lorsque la géométrie de la CAO contient des surfaces splines d'ordre élevé qui n'ont pas de représentation analytique dans la description limitée du 2ème ordre.

- l'utilisation d'un maillage non structurée pour le suivi des particules

Cette méthode repose sur la conversion de la géométrie CAO en un modèle de maillage. Le maillage peut être effectué en utilisant par exemple ANSYS workbench maillage, mais le temps de préparation et de calcul ainsi que la précision géométrique peuvent se révéler insuffisants. Une méthode dite du maillage de tessellation-tétrahydralisation développée par KIT [98] peut être utilisée.

- l'utilisation directe de la CAO

L'utilisation directe de la CAO permet d'utiliser le modèle de base sans supprimer les caractéristiques de la géométrie. Dans cette approche, deux méthodes sont possibles :

- Une première méthode cherche à déterminer l'intersection des rayons avec la géométrie CAO. Cette méthode permet d'utiliser le modèle CAO sans aucune simplification de la géométrie car toutes les opérations sont effectuées dans le noyau CAO natif. De telles approches sont généralement beaucoup plus lentes que leurs implémentations natives (typiquement d'au moins un ordre de grandeur).
- Une deuxième méthode, utilisée par la DAGMC [99], consiste à utiliser des représentations tessellées (à facettes) à haute résolution des surfaces CAO. Cette opération élimine

le besoin de rechercher des racines d'ordre supérieur pendant la navigation et un certain nombre d'accélération sont utilisées pour compenser le nombre élevé de facettes (triangles) requises pour les représentations à haute résolution. La pénalité ici est l'utilisation de la mémoire, mais elle est facilement surmontée avec les grandes quantités de mémoire disponibles sur les postes de travail d'aujourd'hui.

3.2.2 Modélisation de la source

Il existe des méthodes plus ou moins complexes pour modéliser une source de rayonnement, en fonction du type de rayonnement et de la forme sous laquelle la source se présente :

- la méthode la plus précise consiste à utiliser des plans constructeurs spécifiant les paramètres de chaque élément de la source, lorsque cette dernière est émise à l'aide d'un dispositif expérimental ou industriel spécifique tel qu'un accélérateur de particules en radiothérapie ou un réacteur nucléaire par exemple ;
- la méthode la plus simple est de représenter de façon analytique la source de rayonnement à l'aide d'un spectre énergétique théorique ou obtenu expérimentalement ;
- la méthode intermédiaire repose sur la mise en place de sources virtuelles analytiques obtenues à l'aide de données expérimentales ou simulées

Ces différentes méthodologies sont explicitées ci-dessous à l'aide d'exemples.

3.2.2.1 Modélisation d'une source de rayons X pour l'imagerie par transmission

Les sources de rayons X sont poly-énergétiques et collimatées. L'obtention expérimentale de tels spectres est un processus délicat à mettre en oeuvre en raison du débit élevé de particules arrivant sur le détecteur. Des logiciels sont aujourd'hui disponibles pour générer des spectres issus de tubes à rayons X avec une anode en tungstène à l'aide des données fournies dans les notes techniques du constructeur : à partir de la tension maximale et de l'angle de l'anode ces logiciels génèrent un spectre non filtré. Si les éléments de filtration sont fournis par le constructeur il est alors possible d'évaluer le spectre filtré.

Afin d'obtenir un modèle plus fin, des simulations MC sont souvent mises en oeuvre. Il est possible de réaliser une modélisation succincte du tube à partir des données issues des notes techniques constructeurs, quelque soit le matériau utilisé pour l'anode. La modélisation des éléments spécifiques que sont les filtres papillon⁵ est plus ardue, car aucune information n'est fournie par le constructeur dans les notes techniques des appareils. Turner et al [100] proposent une méthode itérative (figures 3.11 et 3.12) basée sur des données expérimentales pour obtenir des modèles de filtres (filtration inhérente et filtre papillon) équivalents à ceux utilisés dans le scanner modélisé. Cette méthode a été mise en oeuvre avec succès dans le travail de thèse de Camille ADRIEN [101, 102].

3.2.2.2 Modélisation de la tête d'un LINAC en radiothérapie

On peut modéliser les faisceaux de radiothérapie de deux façons différentes :

- *Via* un modèle « full MC » : les plans constructeur sont utilisés pour modéliser la tête de l'accélérateur. Il est difficile d'obtenir des informations précises sur la source primaire d'électrons, cette dernière résultant d'une phase d'accélération et d'une phase de déviation d'un

5. filtre en cuivre plus mince au centre que sur les bords permettant de stopper les photons de basse énergie afin d'homogénéiser le faisceau et de le rendre monochromatique

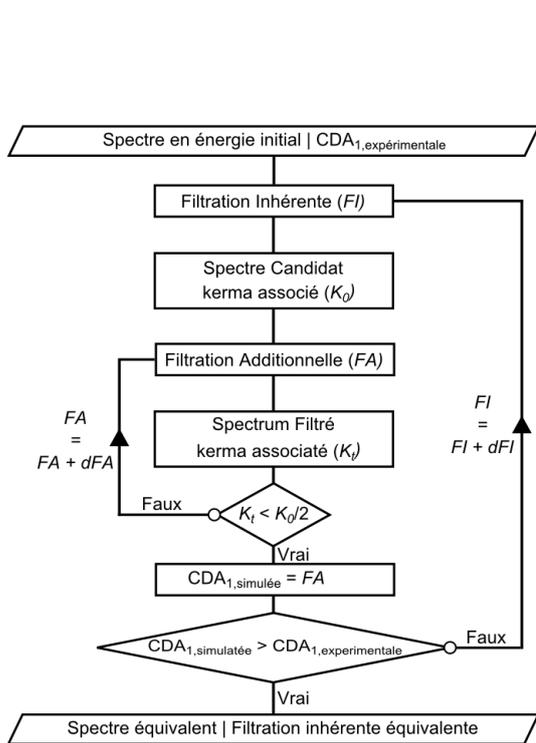


FIGURE 3.11 – Algorithme de Turner utilisé pour obtenir la filtration inhérente équivalente d'un TDM

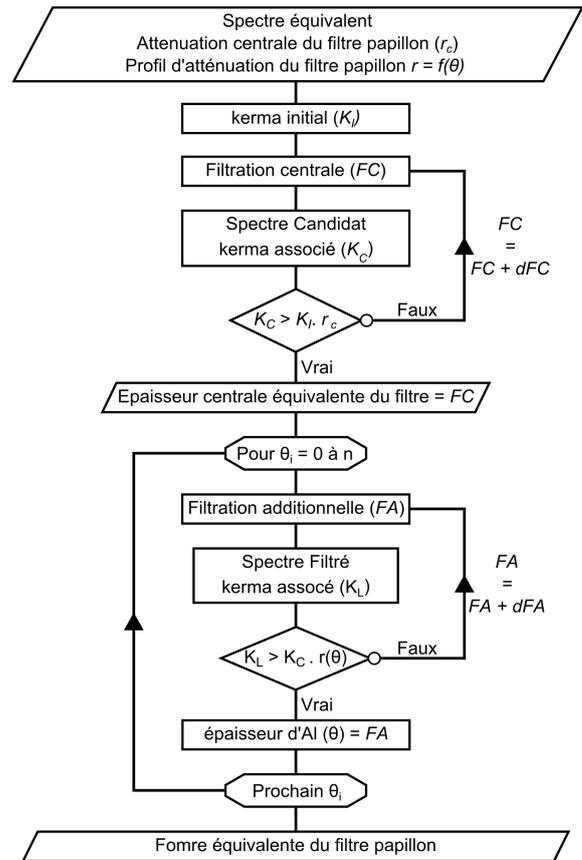


FIGURE 3.12 – Algorithme de Turner utilisé pour obtenir la filtration équivalente à celle du filtre papillon d'un TDM

faisceau d'électrons mono-énergétique. On la modélise géométriquement sous la forme d'un disque (circulaire ou elliptique) appelé "tâche focale", de quelques millimètres de diamètre, la distribution en énergie étant représentée par une distribution gaussienne. Ce modèle est ajusté à l'aide de données expérimentales : le rendement en profondeur⁶ permet d'ajuster l'énergie moyenne du faisceau incident d'électrons sur la cible et les profils de dose⁷ permettent d'ajuster la distribution spatiale de la tâche focale.

- *Via* un modèle de sources virtuelles (MSV) : la source de photons issu du LINAC est modélisé par le biais de plusieurs sources analytiques représentant les éléments de la source. Ce type de modèle est en fait basé sur la décomposition de la dose déposée au patient dans le cadre des traitements par radiothérapie (figure 3.13). Les différentes sources de rayonnement issues des interactions du faisceau de photons primaires dans la tête du LINAC sont :

- Le rayonnement direct (focal) qui correspond aux photons générés par la cible et atteignant le patient sans aucune interaction intermédiaire ;

6. Courbe donnant la variation de la dose absorbée en fonction de la profondeur dans l'eau sur l'axe du faisceau d'irradiation à une distance source-surface du fantôme d'eau fixe

7. Courbes décrivant la variation de la dose absorbée en fonction de la distance dans un plan perpendiculaire à l'axe du faisceau, à différentes profondeurs et pour différentes tailles de champ

- Le rayonnement indirect (extra-focal) qui correspond aux photons générés par la cible et ayant subi des interactions (diffusions en particulier) dans la tête de traitement (cône égalisateur, collimateur,...);
- Les électrons et positrons de contamination émis lors d'interactions avec la tête de traitement ou l'air jusqu'au patient.

Les paramètres de ces différentes sources (distribution spatiale, énergétique, angulaire et corrélations éventuelles) peuvent être obtenus par le biais de la SMC ou *via* des mesures expérimentales.

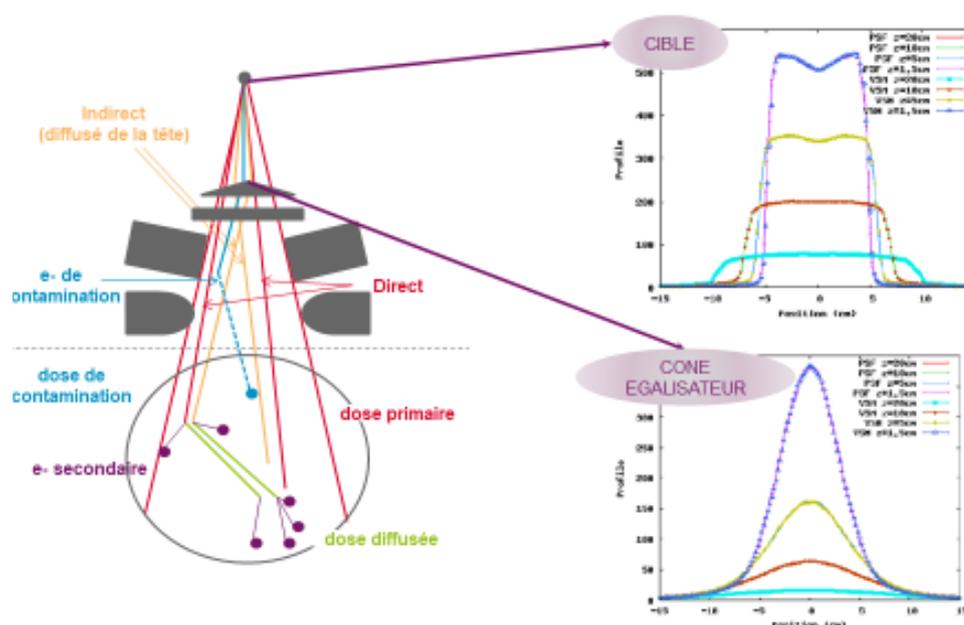


FIGURE 3.13 – Décomposition de la dose et exemple de distributions obtenues pour deux sources d'un modèle de sources virtuelles pour un LINAC

3.2.2.3 Modélisation d'un réacteur

Dans le cadre d'études dédiées au démantèlement d'un réacteur, ce dernier doit être modélisé dans sa globalité soit le coeur, les structures internes de la cuve et la cuve elle-même. La modélisation MC se fait en général à l'aide de plans constructeur complétés, lorsque cela est possible, par des données expérimentales.

Les géométries à modéliser ici représentent l'ensemble des internes de cuve, voire au-delà (jusqu'aux protections biologiques en béton du bâtiment). Elles sont donc complexes à manipuler et des erreurs peuvent survenir lors du développement du modèle, réalisé « à la main ». Afin de contrecarrer ces inconvénients, des méthodes de conversion des fichiers CAO des réacteurs en géométries lisibles par les codes Monte Carlo sont de plus en plus utilisées. Cette conversion se fait en général en deux étapes (voir figure 3.14) : (i) simplification du modèle CAO pour définir un modèle conforme aux exigences des modèles Monte Carlo (utilisation de surfaces quadriques); des codes tels que SpaceClaim Engineer [65] peuvent être utilisés; (ii) traduction du modèle CAO en modèle Monte Carlo; des codes tels que SuperMC [64] sont ici mis en oeuvre.

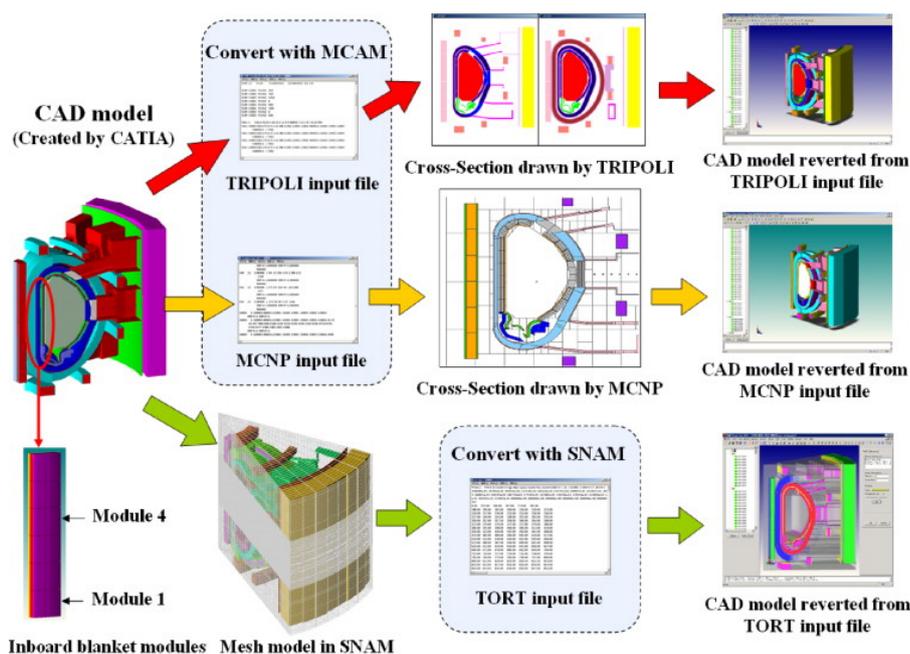


FIGURE 3.14 – Exemple de conversion de fichier CAO en géométrie utilisable par les codes MC

3.2.3 Modélisation de la physique

Quelle que soit la description de l'objet / patient / détecteur / structure / ..., le matériau de chaque composant doit être précisément décrit afin que les interactions soient proprement simulées. Dans le domaine médical, le patient peut être modélisé à l'aide des images DICOM issues d'une acquisition TDM du patient. Il est nécessaire de dériver les paramètres des matériaux à l'aide des unités Hounsfield (correspondant à l'atténuation relative des tissus par rapport à celle de l'eau) stockées dans ces images DICOM. Des méthodes ont été décrites dans la littérature pour réaliser cette paramétrisation. Citons par exemple la calibration stoechiométrique [103] qui permet de convertir les unités Hounsfield en densité. Des études ont été également réalisées pour segmenter l'échelle Hounsfield en jeux de matériaux dosimétriquement équivalents [26]. L'utilisation de ces deux types de méthode nous permet de caractériser chaque tissu du patient à l'aide d'une densité et d'un matériau.

Dans le domaine nucléaire, le point sensible dans les études d'activation neutronique des structures est l'établissement des concentrations en impuretés dans les aciers composant les structures internes de la cuve. Par exemple, dans les phases de conception de nouveaux réacteurs, l'objectif est d'éliminer ou de réduire au minimum les éléments d'un alliage qui produiraient des isotopes radioactifs de longue durée pendant l'irradiation. L'accent est généralement mis dans le processus de développement sur l'élimination du Nb, du Cu, du Ni, du Mo et du N, éléments d'alliage largement utilisés. Le niobium reçoit généralement le plus d'attention en raison des très faibles valeurs en concentration (1 wppm) qu'il faut respecter pour que l'acier atteigne les critères restrictifs requis en terme d'activation. Ce sont principalement ces impuretés qui vont subir l'activation neutronique et donc contribuer à la catégorisation des déchets, mais également au débit d'équivalent de dose ambiant. Lorsque cela est possible, des données issues de mesures destructives sur certains échantillons sont utilisées pour déterminer la concentration des impuretés. Si de telles données ne sont

pas disponibles, le niveau des impuretés est majoré et des études d'impact sont réalisées.

3.2.4 Stockage des informations

Le principal avantage de la simulation MC est que tous les paramètres de l'histoire de chaque particule peuvent théoriquement être suivis. Les informations les plus intéressantes à stocker sont :

- la nature de l'événement détecté (diffusé ou non),
- l'énergie de l'événement détecté,
- la localisation et l'énergie initiale de l'émission,
- la localisation des interactions dans le patient, le détecteur, la structure, ...
- le temps de détection,
- la fluence des particules,
- la quantité d'énergie déposée dans un certain volume.

Dans ce document, nous nous intéresserons principalement aux informations dosimétriques soit l'estimation de la dose déposée par un faisceau de photons ou d'électrons, l'estimation de la dose reçue dans le cas d'une irradiation externe ou d'une contamination interne, l'estimation du débit d'équivalent de dose dans le cas d'étude de radioprotection dédiées aux réacteurs.

En conclusion, en simulation Monte Carlo le degré de précision qui peut être atteint est déterminé par les facteurs suivants : la précision des sections efficaces utilisées pour simuler les différentes interactions rayonnements-matière, la précision avec laquelle les faisceaux sont modélisés en termes de distributions en énergie et en direction, la précision statistique de la méthode elle-même déterminée par le nombre d'histoires simulées, la précision avec laquelle la géométrie du patient et les propriétés des tissus sont modélisées. En fonction de l'application visée, les données et niveaux de précision sont ajustés.

Au cours de mes activités de recherche, je me suis principalement focalisée sur les applications de la SMC dans le domaine de la radioprotection (patient pour les applications médicales - opérateurs ou déchets pour les applications nucléaires).

Dans la suite du document, sont détaillées via des articles publiés dans différentes revues, mes contributions dans l'utilisation et le développement de méthodes Monte Carlo pour différentes thématiques :

- *l'aide à la conception dans les domaines de la fusion et de l'imagerie médicale dans la partie II,*
- *la prédiction et le suivi de la dose au patient dans le domaine médical et nucléaire dans la partie III,*
- *la caractérisation de données d'activation pour l'assainissement-démantèlement dans la partie IV.*

PARTIE II

AIDE À LA CONCEPTION

La simulation Monte Carlo est une technique utilisée pour modéliser et analyser des systèmes nucléaires et médicaux du monde réel. Lors de la phase de conception d'un nouveau système, elle permet de quantifier l'impact de différents facteurs d'ordre technologique, physique voire humain sur le fonctionnement du système lui-même et son environnement *via* l'estimation d'observables d'intérêt. Dans cette partie, je vais menées trois études de conception que j'ai abordées dans le domaine médical et nucléaire :

- L'analyse de la distribution des points d'annihilation en imagerie nucléaire

Dans le domaine de l'imagerie, les simulations Monte Carlo sont largement utilisées pour guider, non seulement la conception et l'optimisation des détecteurs, mais également pour développer et évaluer de nouveaux algorithmes de reconstruction et de nouvelles méthodes de correction des effets physiques "indésirables". La compensation de certains effets parasites peut rendre délicate l'estimation expérimentale de ces effets parasites. Les simulations Monte Carlo permettent la modélisation précise des processus de formation des images, incluant tous ces effets perturbateurs.

Le parcours des positons est l'un des facteurs qui limitent fondamentalement la résolution spatiale des images TEP. Avec la résolution plus élevée des systèmes d'imagerie dédiés aux petits animaux et l'intérêt accru pour l'utilisation d'émetteurs de positons à énergie plus élevée que le ^{18}F , il est important de tenir compte des effets de parcours lors de la conception de méthodes de reconstruction d'images.

L'étude de ces effets est détaillée dans le chapitre 4. Elle fait suite à mon travail de doctorat et a été réalisée à l'initiative d'un collaborateur danois intéressé par mes travaux de thèse.

- La faisabilité d'un monitoring en temps réel de la dose déposée en radiothérapie

La radiothérapie moderne repose sur une planification avancée de haute précision, afin d'administrer des doses de rayonnement élevées à une cible définie avec précision chez les patients. Malgré ces performances, en France, près de 200000 patients souffrent encore de cancers résistants à la radiothérapie. En effet, l'une des principales difficultés de la radiothérapie par faisceau externe est que les tumeurs et les tissus environnants se déplacent de manière significative et imprévisible pendant et entre les séances de radiothérapie, ce qui complique l'administration de doses de rayonnement élevées à une cible précise. Une façon de minimiser ce problème est l'implantation de marqueurs dans ou à côté de la tumeur permettant une imagerie fréquente et l'adaptation au traitement. Les progrès récents en nanotechnologie ont fourni de nouvelles opportunités pour le développement de modalités de radiothérapie ciblées utilisant des nanoparticules d'or (GNP⁸) pour augmenter davantage l'efficacité thérapeutique de la radiothérapie externe. L'avantage supplémentaire des GNP est qu'elles permettent l'obtention d'images de fort contraste, lorsqu'elles sont irradiées par un faisceau de rayons X permettant ainsi l'acquisition d'images ciblées sur le volume tumoral au cours du traitement. Dans ce cas, serait-il possible de profiter de ces images pour mesurer la dose reçue par le patient lors du traitement ?

Pour répondre à cette question, en 2015, j'ai pris contact avec deux collègues du CEA LIST

8. Gold NanoParticles

spécialisés dans le domaine du CND, Dominique Chambellan et David Tisseur, ainsi qu'avec Olivier Limousin, spécialiste de détecteurs de rayons X pour l'astronomie spatiale à l'Irfu. Depuis quatorze ans, l'équipe d'Olivier Limousin s'attache à produire des générations successives de détecteurs X à partir de la technologie CdTe (tellurure de cadmium), embarquée en 2002 à bord du satellite européen Integral (INTErnational Gamma-Ray Astrophysics Laboratory). Les performances de ces détecteurs sont idéales pour étudier, avec " la plus belle " des résolutions spectrales, les raies du titane 44 au cours des explosions d'étoiles (supernovae) ou bien la fluorescence X de l'or. Des mesures exploratoires effectuées pour tester la faisabilité d'une telle imagerie ont donné lieu à l'article mentionné dans le second chapitre de cette partie ainsi qu'au projet transversal SATBOT.

- L'aide à l'établissement d'un plan de maintenance du casque de transport d'ITER

La conception des réacteurs nucléaires et des installations du cycle repose, d'une part, sur le dimensionnement d'ouvrages et d'équipements afin qu'ils puissent remplir leurs missions dans un certain nombre de situations internes et externes, d'autre part, sur des études de vérification du comportement de ces installations, afin d'en évaluer l'impact, pour les travailleurs et le public.

Dans le cycle de vie de la conception technique de ITER, des examens de conception sont organisés pour la responsabilité technique et programmatique. Un examen de la conception fournit une évaluation approfondie, par une équipe indépendante d'experts, que la conception (ou le concept) est réaliste et réalisable d'un point de vue programmatique et technique. Les revues de conception des systèmes sont les suivantes :

- La CDR⁹ (Conceptual Design Review) a pour objectif de vérifier que les données d'entrée du concept sont définies (exigences, interfaces et planning), que le concept et les choix technologiques réalisés sont pertinents et que le système assure les fonctions qui lui sont assignées et les exigences du projet.
- La PDR¹⁰ (Preliminary Design Review) a pour objectif, en plus des objectifs de la CDR, de vérifier que le concept est cohérent dans ses interfaces avec tous les autres systèmes de la machine, que la fabricabilité, le transport et l'assemblage du système ont été vérifiés, et que les opérations de fonctionnement du système dans la machine sont définies.
- La FDR¹¹ (Final Design Review) a pour objectif de vérifier que le système est prêt à être fabriqué et que tous les problèmes de conception sont résolus, que les procédures de fabrication sont définies, que les spécifications de qualification du système sont figées et que la fabricabilité, le transport, l'assemblage, la qualification et le démarrage du système sont définies et en accord avec les parties prenantes.

La neutronique est en support à chacune de ces phases pour fournir des données d'entrée à d'autres disciplines (thermomécanique), pour vérifier les exigences en termes d'exposition aux rayonnements des matériels ou des personnels ou pour apporter des solutions en termes de concept quand des optimisations sont nécessaires (écrans, géométrie des canaux/trous pour la protection contre les rayonnements). Pour cela, un modèle MCNP du tokamak et de son

9. Critical Design Review

10. Preliminary Design Review

11. Final Design Review

environnement est régulièrement mis à jour à l'aide de données issues de la CAO [104]. Dans le cadre des SSA-57 et SSA-62, j'ai participé aux analyses de sûreté de la hotte de transfert de ITER en phase de maintenance, en particulier en étudiant les débits de dose induits par l'activation des poussières.

Chapitre 4

Reconstruction d'image en médecine nucléaire

L'objectif lors d'un examen TEP est idéalement de refléter la concentration de l'activité de produits pharmaceutiques administrés dans chaque voxel des images reconstruites. Au cours des dernières années, la TEP associée à l'utilisation du ^{18}F -FDG¹ a joué un rôle important en oncologie en permettant, en particulier, la détection de petites lésions oncologiques dans différentes structures et lieux. Cependant, la capacité à quantifier précisément la concentration de l'activité dépend d'un certain nombre de facteurs physiques et biologiques.

En effet, les processus physiques d'émission et de détection des photons gamma sont caractérisés par des facteurs qui limitent la résolution spatiale du système : la taille du détecteur, le parcours du positon, la non-collinéarité des photons d'annihilation, le couplage détecteurs-photomultiplicateurs et les interférences de détection entre les cristaux adjacents. En conséquence de la résolution spatiale limitée, les images PET sont caractérisées par un effet de volume partiel et de débordement qui limitent la précision dans l'estimation de la concentration du radiotraceur pour les petits objets. Plus spécifiquement, une prise en compte biaisé du parcours des positons peut entraîné un flou dans l'image finale.

En routine clinique, le parcours du positon est généralement considéré comme mineur dans la résolution de l'imagerie TEP-FDG² corps entier [105]. Pour des isotopes émettant des positons de plus haute énergie que le ^{18}F , l'influence du parcours du positon peut conduire à une dégradation de la résolution en fonction des tissus traversés. Dans l'eau, le parcours moyen du positon varie de 0.6 (^{18}F) à 6 mm (^{82}Rb) en fonction de l'isotope considéré [20]. Dans les tissus biologiques, le produit {parcours moyen \times densité} est constant ce qui induit une variation du parcours moyen en fonction du tissu considéré : ainsi pour les positons émis par le ^{18}F le parcours moyen varie de 0.037 mm dans l'os (1.92 g/cm^3) à 0.244 mm dans les poumons (0.26 g/cm^3) [106]. Cet effet est tout particulièrement visible aux interfaces avec le poumon. Des études expérimentales [107] ont mis en évidence que le parcours des positons dans différents tissus a un fort impact sur la résolution spatiale et la quantification des images TEP. La prise en compte du parcours du positon conduit alors à une réduction de la concentration d'activité dans la région source. Cet effet est d'autant plus perceptible que le matériau traversé est peu dense, comme c'est le cas pour le poumon. Par consé-

1. Fluorodésoxyglucose

2. TEP au fluorodesoxyglucose marqué au ^{18}F

quent, des précautions supplémentaires doivent être prises lors du calcul des échelles d'absorption standardisées SUV³ dans les images TEP, en particulier lorsque les produits radiopharmaceutiques sont absorbés par différents tissus dans le corps, et d'autant plus lorsque des émetteurs de positons à haute énergie sont injectés.

Le flou dû à l'effet du parcours du positon peut être abordé de différentes façons [108]. La plus courante est de convoluer les données détectées avec une fonction représentant le parcours du positon. Cette méthode est celle typiquement implémentée dans les algorithmes classiques de rétro-projection filtrée ou FBP⁴ [109]. Dans les algorithmes de reconstruction itératifs, la correction est obtenue en incorporant une distribution de probabilité du parcours du positon dans la matrice de rétro-projection [110]. Les méthodes itératives de reconstruction d'image utilisent en effet un système de matrice qui couple le taux de coïncidences le long de chaque LOR⁵ à l'activité dans les différents voxels. Cette matrice prend en compte tous les processus qui influencent les coups mesurés le long de chaque LOR. La modélisation du parcours du positon ou modélisation de la réponse impulsionnelle du système d'imagerie aussi appelée fonction de distribution ponctuelle ou PSF⁶ prend en compte ces effets soit pendant la reconstruction [111] soit après la reconstruction sous la forme d'une convolution [112]. De telles corrections sont aujourd'hui implémentés au cours de la reconstruction sur les machines Siemens (HD) et GE (SharpIR) et/ou après la reconstruction chez Philips. La prise en compte de la PSF dans la reconstruction conduit à une résolution spatiale plus fine et plus uniforme le long du FOV⁷ transaxial. Certains inconvénients peuvent cependant être visibles comme une augmentation du bruit ou des artefacts de Gibbs [113]. Ces inconvénients dépendent cependant de la méthode utilisée pour générer le noyau du PSF. Ainsi dans [114] à partir d'une carte d'atténuation du corps du patient, un noyau de flou est calculé puis utilisé dans l'algorithme de reconstruction OSEM⁸ modifié. Des résultats obtenus pour une acquisition cardiaque TEP au ⁸²Rb suggèrent une amélioration des propriétés de l'image en terme de résolution et bruit. L'approche proposée par [115] et [116] a été implémentée par [117] dans un algorithme itératif. Les noyaux de flou ont été obtenus par simulation Monte Carlo (MC) et correspondent à une matrice 3D dont chaque voxel représente le nombre d'événements détectés dans le volume unitaire. L'objet imagé a été convolué avec ce noyau au cours de la phase de projection. La méthode de correction proposée a été évaluée sur des fantômes préalablement filtrés avec les noyaux calculés pour prendre en compte le parcours du positon. L'analyse des images reconstruites montre que cette correction est capable de restaurer substantiellement l'activité moyenne dans les régions de fort contraste et en présence d'interfaces nettes entre tissus au prix cependant d'une augmentation du bruit dans l'image.

Les imageurs hybrides TEP/IRM⁹ combinent les informations issues de l'imagerie par résonance magnétique (IRM) et de la TEP et sont susceptibles d'améliorer la résolution spatiale de la TEP. Ceci est particulièrement vrai dans le plan perpendiculaire au champ magnétique statique du scanner, en raison du confinement du parcours du positon par le champ magnétique de l'IRM [118]. Ce n'est cependant pas le cas dans la direction parallèle à celle du champ magnétique. Cette différence crée une résolution non uniforme dans les images avec un impact sur la répartition reconstruite des radiotraceurs. Les approches mises en oeuvre en TEP peuvent également être appliquées dans

3. Standardized Uptake Value

4. Filtered Back Projection

5. Line Of Response

6. Point Spread Function

7. Field-Of-View

8. Ordered Subset Expectation Maximization

9. système d'imagerie hybride combinant la TEP et l'IRM

les machines hybrides TEP/IRM afin de diminuer l'impact du parcours du positon. La correction proposée par [117] par exemple permet ainsi de corriger la résolution non-isotropique le long du plan axial.

La plupart des travaux mentionnés ci-dessus se sont concentrés sur l'analyse des distributions 3D des points d'annihilation issus d'un point source pour mettre au point les algorithmes de reconstruction utilisés en TEP. Or, le principe de la TEP est de mesurer des LOR et non des lieux d'annihilation. L'analyse de la distribution 2D des points d'annihilation semble donc plus pertinente pour proposer un algorithme de correction implémentable en TEP.

Cette analyse a fait l'objet d'un travail en collaboration avec Lars Jodal de l'Hôpital Universitaire d'Aalborg au Danemark.

Un point source émettant des positons conduit à une distribution 3D des points d'annihilation caractérisant l'effet du parcours des positons sur les images reconstruites. Cependant, étant donné qu'une caméra TEP détecte des LOR et non des positions d'annihilation, ces distributions 3D sont difficiles à estimer par la mesure. Ce constat est également observé avec les nouvelles machines à temps de vol ou time of flight (TOF¹⁰) qui réduisent la longueur de la rétroprojection sur la LOR sans pour autant déterminer précisément le lieu de l'annihilation. Pour déterminer expérimentalement le parcours du positon [105] une série de mesures doivent être réalisées au cours desquelles un seul plan fin est mesuré à la fois, ce qui correspond en fait à projeter la distribution 3D des points d'annihilation sur une ligne.

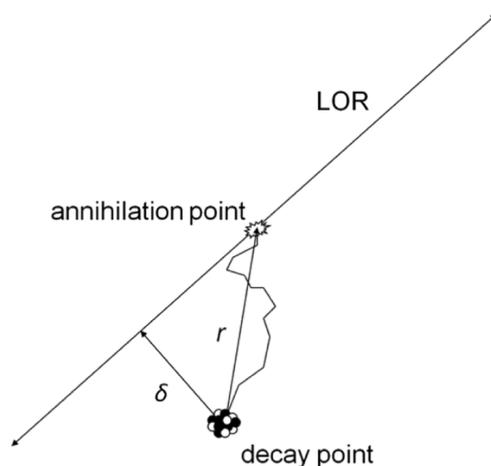


FIGURE 4.1 – Le positon se déplace en 3D avec un parcours r correspondant à la distance jusqu'au point d'annihilation. Les scanners TEP (classiques et TOF) ne mesurent pas le lieu d'annihilation mais la position de la ligne (LOR) définie par les photons détectés. Le déplacement δ de la LOR est la quantité directement associée à la donnée mesurée.

Considérons maintenant une paire de détecteurs plutôt que l'anneau complet des détecteurs. Cette paire de détecteurs détecte les événements survenus dans le plan contenant le point de désin-

10. Time Of Flight

tégration et orthogonal à la LOR définie par les 2 détecteurs (figure 4.1). Dans ce cas le parcours du positon influence la résolution axiale (en 1D) mais également la résolution transverse. La projection 2D des points d'annihilation semble alors intéressante à étudier et à introduire dans des algorithmes de reconstruction.

Peu d'études ont été consacrées à la distribution 2D des points d'annihilation. Derenzo [105] a déterminé expérimentalement la fraction projetée d'annihilations sur un cercle, Sanchez-Crespo, Andreo et Larsson [119] ont reporté des PSF pour le ^{18}F , ^{15}O et ^{82}Rb et Cal-Gonzales et *al.* [120, 121] ont étudié des distributions 2D des points d'annihilation.

Au cours de notre étude, nous avons donc utilisé la simulation Monte Carlo pour déterminer des distributions 2D des points d'annihilation pour les isotopes les plus utilisés en TEP et avons proposé une procédure systématique pour les générer [106]. Cette méthodologie a été utilisée à nouveau récemment pour étudier expérimentalement le parcours du positon dans différents équivalents tissus tels que le poumon [107].

Positron range in PET imaging: an alternative approach for assessing and correcting the blurring

L Jødal¹, C Le Loirec² and C Champion³

¹ Department of Nuclear Medicine, Aalborg University Hospital, Denmark

² Laboratoire Modélisation, Simulation et Systèmes, DRT/LIST/DCSI/LM2S, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette, France

³ Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Université Paul Verlaine-Metz, France

E-mail: lajo@rn.dk

Received 19 December 2011, in final form 12 April 2012

Published 30 May 2012

Online at stacks.iop.org/PMB/57/3931

Abstract

Positron range impairs resolution in PET imaging, especially for high-energy emitters and for small-animal PET. De-blurring in image reconstruction is possible if the blurring distribution is known. Furthermore, the percentage of annihilation events within a given distance from the point of positron emission is relevant for assessing statistical noise. This paper aims to determine the positron range distribution relevant for blurring for seven medically relevant PET isotopes, ¹⁸F, ¹¹C, ¹³N, ¹⁵O, ⁶⁸Ga, ⁶²Cu and ⁸²Rb, and derive empirical formulas for the distributions. This paper focuses on allowed-decay isotopes. It is argued that blurring at the detection level should not be described by the positron range r , but instead the 2D projected distance δ (equal to the closest distance between decay and line of response). To determine these 2D distributions, results from a dedicated positron track-structure Monte Carlo code, Electron and POSitron TRANsport (EPOTRAN), were used. Materials other than water were studied with PENELOPE. The radial cumulative probability distribution $G_{2D}(\delta)$ and the radial probability density distribution $g_{2D}(\delta)$ were determined. $G_{2D}(\delta)$ could be approximated by the empirical function $1 - \exp(-A\delta^2 - B\delta)$, where $A = 0.0266 (E_{\text{mean}})^{-1.716}$ and $B = 0.1119 (E_{\text{mean}})^{-1.934}$, with E_{mean} being the mean positron energy in MeV and δ in mm. The radial density distribution $g_{2D}(\delta)$ could be approximated by differentiation of $G_{2D}(\delta)$. Distributions in other media were very similar to water. The positron range is important for improved resolution in PET imaging. Relevant distributions for the positron range have been derived for seven isotopes. Distributions for other allowed-decay isotopes may be estimated with the above formulas.

1. Introduction

Because of the improving spatial resolution of the physical detectors, the distance from positron emission to positron annihilation (positron range) is becoming a factor of increasing importance for the spatial resolution of positron emission tomography (PET). The positron range introduces uncertainty in the position of the positron emitter, resulting in blurring of the PET images. This effect is very clearly seen for high-energy emitters such as ^{82}Rb , and also for less energetic emitters in small-animal PET imaging where blurring on a millimetre scale is important.

While the positron range in itself is a fundamental physical aspect of the slowing-down processes leading to annihilation, it is possible to correct for the blurring in the reconstructed images, if the reconstruction algorithm incorporates knowledge of the spatial distribution of the blurring effect (Cal-González *et al* 2009, Rahmim *et al* 2008, Ruangma *et al* 2006). Therefore, the distribution of positron ranges and its effect on PET imaging are subjects of prime importance, especially as technical advances may further improve detector resolution.

A point source emitting positrons will give rise to a three-dimensional (3D) distribution of annihilation points, which will characterize the positron range effect in the reconstructed images. But since a PET scanner measures lines of response (LORs), not annihilation positions, the 3D distribution is hard to measure directly (this also holds for time-of-flight PET, which reduces the length of the LOR, but still does not determine a point position). To determine the positron range, Derenzo (1979) made a series of often-cited measurements using material of very low density, in an experimental set-up where only a narrow plane was measured at a time. This corresponds to projecting the 3D annihilation distribution onto a single line, giving the 1D representation often used in papers on the positron range, see e.g. (Blanco 2006, Champion and Le Loirec 2007, Levin and Hoffman 1999).

However, considering a single detector pair (rather than a full detector ring), the logical projection will be 2D: the detector pair measures in the plane orthogonal to the LOR defined by the two detectors, and the positron range influences not only axial resolution (1D) but also transversal resolution. Thus, for a reconstruction algorithm modelling a positron range at the level of LORs, the distribution of the 2D projection of annihilation points will be very relevant.

In any homogeneous medium and in the absence of a magnetic field, the situation is spherically symmetrical, and the mathematical information in the 3D, 1D and 2D distributions will be the same, but converting e.g. a 1D distribution to a 2D distribution is not a simple calculation. However, 2D projections seem to have been given only little attention in the literature. Derenzo (1979) computed curves for ^{11}C , ^{68}Ga and ^{82}Rb (from a ^{82}Sr source, which decays to ^{82}Rb by electron capture) showing the ‘fraction-projected annihilations occurring within a circle of radius R ’, i.e. the cumulated 2D probability distribution. Sánchez-Crespo *et al* (2004) investigated ^{18}F , ^{15}O and ^{82}Rb by projecting the 3D distribution onto a plane and reported point spread functions (PSFs) of this projection along a line. And recently, Cal-González *et al* (2010) and (2011) have considered 2D representations of the annihilation distribution and compared them with other representations. But little other work seems to have been conducted on 2D representations of the annihilation distribution.

This work aims to determine in details the cumulative 2D distributions for a series of medically relevant PET isotopes by means of a previously published dedicated positron track-structure Monte Carlo simulation (Champion and Le Loirec 2006, 2007). Furthermore, it is aimed to provide a systematic procedure for estimating the cumulative distribution for other allowed-decay PET isotopes given only the mean positron energy E_{mean} . (Let us note that beta decay is allowed if parity is unchanged and nuclear spin change is 0 or ± 1 (Krane 1988), e.g. $1^+ \rightarrow 0^+$ as in the decay $^{18}\text{F} \rightarrow ^{18}\text{O}$.) The focus on allowed-decay PET isotopes is

practical. The energy distributions can be described by known, analytical functions, and many of the medical PET isotopes decay by allowed decay. Besides, differential distributions will be provided by following the same methodology. The results from the present Monte Carlo code (EPOTRAN, Electron and POSitron TRANsport in liquid and gaseous water) are compared with results from the more common PENELOPE code, and the influence of biological media other than water is estimated.

2. Material and methods

2.1. Geometry and notation

The complete blurring of a point source in an actual measurement will depend not only on positron range but also on photon non-collinearity and the properties of the detection system (such as crystal size and depth of interaction). However, all these effects can be considered individually and afterwards combined (Levin and Hoffman 1999, Qi *et al* 1998, Rahmim *et al* 2008). In the present context, we will assume point-like detectors and 180° relative angle of the two photons emitted from annihilations, i.e. we focus on the positron range.

Consider a point source located at (0, 0, 0) in a Cartesian coordinate system. Assuming spherical symmetry, the volume density $f(x, y, z)$ of annihilations is a function of the positron range: $f(x, y, z) = f(r)$, where $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Following the notation of Cal-González *et al* (2010), we will define the radial density as $g_{3D}(r) = 4\pi r^2 f(r) = 4\pi r^2 f(x, y, z)$.

The LORs measured parallel to a given direction will be cylindrically symmetrically distributed. As the distribution of LORs will be the same for all directions, we can treat the situation as if all LORs were parallel to the same direction. Taking the z -axis as the (arbitrary) choice of direction, the projection is onto the xy -plane. The distance from origin in 2D, $\delta = \sqrt{x^2 + y^2}$, corresponds to the distance between the point source and the LOR. The 2D density distribution $f(x, y)$ is a function of these distances, $f(x, y) = f(\delta)$, with radial density $g_{2D}(\delta) = 2\pi\delta f(\delta)$.

The cumulative probability distribution $G_{2D}(\delta)$, i.e. the probability that a LOR will have a distance from the point source no greater than δ , can be calculated by integration:

$$G_{2D}(\delta) = \int_0^\delta g_{2D}(\delta') d\delta'. \quad (1)$$

Our notation for g_{2D} and G_{2D} is consistent with that of Cal-González *et al* (2010), except that we have chosen letter δ for the 2D radius (LOR distances from point source), reserving r for the 3D radius (positron range).

2.2. Positron energy spectra and Monte Carlo simulation

The following series of medically relevant PET isotopes were considered: ^{18}F , ^{11}C , ^{13}N , ^{15}O , ^{68}Ga , ^{62}Cu and ^{82}Rb . These all are allowed-decay isotopes whose energetic disintegration spectra are represented by (Venkataramaiah *et al* 1985)

$$N(E) dE = C \cdot F(Z, E) \cdot p \cdot E \cdot (E_{\max} - E) dE, \quad (2)$$

with E and E_{\max} being the energy and maximal energy of β particles, respectively, p the corresponding momentum and C a normalization constant. $F(Z, E)$ represents the Fermi factor used for taking into account the effect of the Coulomb field on the electron distribution.

The 3D distributions $f(x, y, z)$ of annihilation points were determined by using the full-differential Monte Carlo track-structure code called EPOTRAN developed by Champion and Le Loirec to study the decay of positron emitters of medical interest (Champion and Le

Loirec 2007, Le Loirec and Champion 2007). In brief, for each isotope considered, a large number (about 250 000) of positron tracks were simulated until annihilation, including all the processes, namely ionization, excitation, elastic scattering and positronium (Ps) formation. For more details, we refer the interested reader to (Champion *et al* 2012). The distributions $g_{2D}(\delta)$ were determined by binning $\delta = \sqrt{x^2 + y^2}$ into 10 μm bins. Finally, the cumulative probability $G_{2D}(\delta)$ was determined by numerical integration of g_{2D} .

2.3. Generalization of distributions

The resultant functions $G_{2D}(\delta)$ were compared among isotopes in two ways, namely either by plotting $G_{2D}(\delta)$ as a function of δ or by plotting $G_{2D}(\delta)$ as a function of δ/R_{mean} , where R_{mean} is the mean range of positrons for the isotope under consideration:

$$R_{\text{mean}} = \int \int \int r \cdot f(x, y, z) \, dx \, dy \, dz = \int_0^{\infty} r \cdot g_{3D}(r) \, dr. \quad (3)$$

An empirical formula for $G_{2D}(\delta)$ was then derived for each allowed-decay isotope, based on two adjustable parameters. The dependence of the parameters on mean positron energy E_{mean} was also investigated. To estimate differential distributions $g_{2D}(\delta)$, the empirical formula for $G_{2D}(\delta)$ was differentiated, and the results compared with the distributions of $g_{2D}(\delta)$ which were determined from the Monte Carlo data.

2.4. Effects of variation in biological tissues

For a medium of a given composition, the range and thereby δ will scale inversely with density. But the shape of the positron range distribution may change with different composition (Lehnert *et al* 2011).

Presently, EPOTRAN is not able to simulate a positron track structure in a biological medium other than water. We have thus used the Monte Carlo code PENELOPE (2006 release) (Salvat *et al* 2006) first to compare the density-scaled range of positrons in biologically relevant materials with the range in water and secondly to study the decay of ^{18}F in water, lung and bone.

PENELOPE is a Monte Carlo code of general purpose that permits us to simulate the coupled transport of photons, electrons and positrons in matter with a very good accuracy at low energies. Photons are transported within the conventional detailed method, whereas electrons and positrons are simulated using a mixed scheme where interactions are classified into hard and soft. Hard events are simulated step by step and involve angular deflection or energy losses above user-defined cutoffs, whereas soft events occurring between two hard collisions are simulated by means of an artificial single event. Simulation is controlled by seven parameters, fixed for the various materials used in the geometry:

- (i) The absorption energy E_{abs} is the energy at which the track evolution is stopped. The kinetic energy of the particle is then locally deposited.
- (ii) C_1 is the average angular deflection between two hard elastic collisions.
- (iii) C_2 is the maximal fractional energy loss between two hard elastic collisions.
- (iv) W_{CC} is the cutoff energy for hard inelastic interactions.
- (v) W_{CR} is the cutoff energy for hard bremsstrahlung emission.

To be as close as possible as the simulations performed with EPOTRAN, we have chosen for water, lung and bone the same set of parameters which corresponds to a detailed simulation; thus $E_{\text{abs}} = 100$ keV for photons, electrons and positrons and C_1 , C_2 , W_{CC} and W_{CR} are equal to zero.

Table 1. Mean and maximum values for energy and range for the emitted positrons (Champion and Le Loirec 2007, Le Loirec and Champion 2007).

Isotopes	E_{mean} (keV)	E_{max} (keV)	R_{mean} (mm)	Literature R_{mean} (mm) ^a	R_{max} (mm)
¹⁸ F	252	635	0.660	0.6	2.633
¹¹ C	390	970	1.266	1.1	4.456
¹³ N	488	1190	1.730	1.5	5.572
¹⁵ O	730	1720	2.965	2.5	9.132
⁶⁸ Ga	844	1899	3.559	2.9	10.273
⁶² Cu	1280.6	2926	6.077		16.149
⁸² Rb	1551	3378	7.491	5.9	18.603

^a(Partridge *et al* 2006).

Tracking particles in PENELOPE is not obvious. It is however possible to determine the point of creation of particles, and in our case of annihilation photons. We have thus used a geometry consisting in concentric cylinders separated by 10 μm , which is the bin used for the distribution $g_{2D}(\delta)$. The cylinders are centred on (0,0,0) which is the point of emission of positrons and they are full of water, bone or lung depending on the tissue under investigation. The simulation runs until the photons are detected on a spherical phase-space file which stores a lot of information concerning the particles and especially the body (the cylinder in our case) where they have been created. Thanks to these data, we can thus determine directly the 2D distribution of annihilation points and obtain the cumulative probability $G_{2D}(\delta)$.

3. Results

3.1. Ranges and cumulative probability distributions

The investigated radio-isotopes are listed in table 1 along with the mean and maximum values for energy and range for the emitted positrons (for more details see Champion and Le Loirec (2007) and Le Loirec and Champion (2007)). Compared to other results from the literature (see table 1 and figure 1), we obtain somewhat larger values for R_{mean} . This difference is due to the inclusion of Ps formation in the simulation, as the electrically neutral Ps loses energy more slowly than the charged e^+ particle (Champion 2003, Champion and Le Loirec 2006).

The literature results for R_{mean} do not include experimental data. Experimental results on R_{mean} are, unfortunately, scarce. Cho *et al* (1975) measured a line source and determined an ‘effective range’ from the FW(0.1)M on this distribution, and Derenzo (1979), (1986) determined the root-mean-square spread for the 1D distribution. While such data can be used as indicators for R_{mean} , we are not aware of experimental results that aim at determining R_{mean} as such.

It should be mentioned that while the Monte Carlo code used here assumes the neutral Ps to lose its kinetic energy mainly through phonon interactions at all energies, recent experimental results (Brawley *et al* 2010a, 2010b) found unexpectedly large Ps interactions at sub-keV energies. While these results are in themselves very interesting, a discrepancy in Ps cross section at very low energy will only have marginal influence on our results, since most of the path travelled by Ps will be with much higher kinetic energy.

The calculated cumulative probabilities $G_{2D}(\delta)$ for the closest distance δ are shown in figure 2. Not surprisingly, the distance δ that includes a given fraction of the LORs depends on the energy spectrum of the emitted positrons. However, when the same data are plotted as a function of δ/R_{mean} , i.e. scaled by the isotope-dependent mean range, the results are rather similar among isotopes (see figure 3).

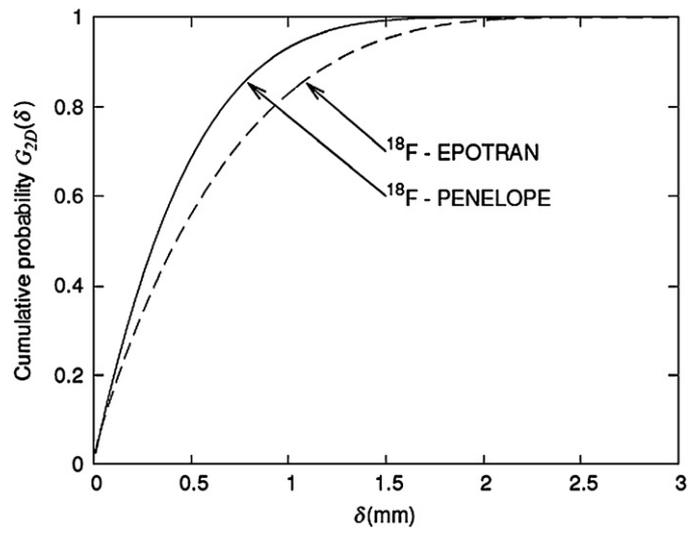


Figure 1. Cumulative probabilities for ^{18}F obtained with EPOTRAN and PENELOPE.

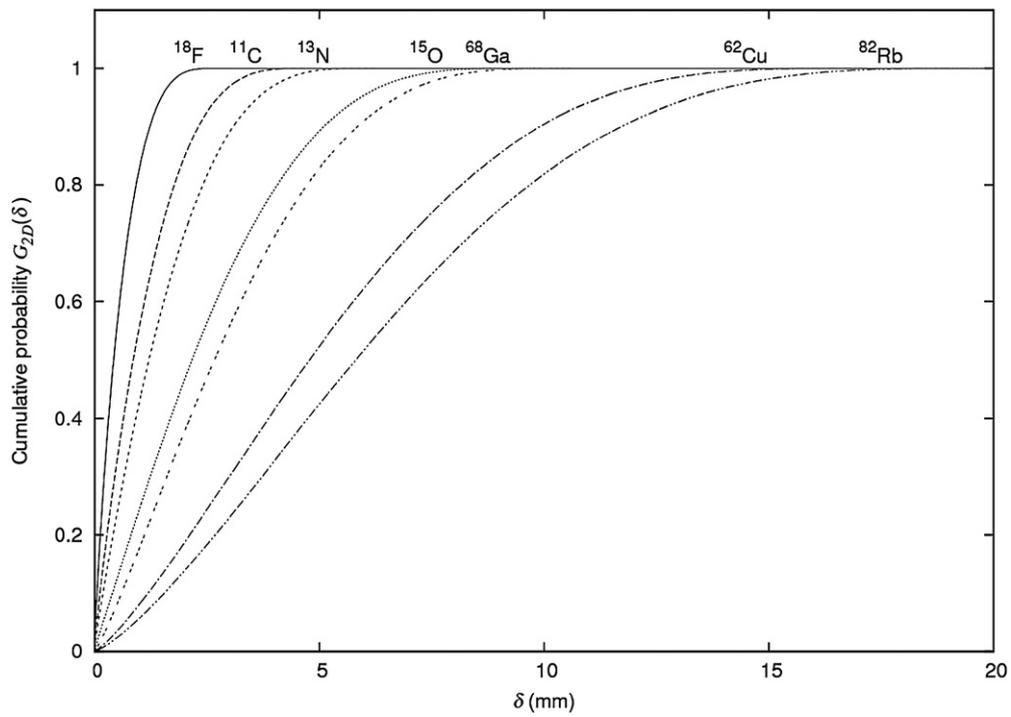


Figure 2. Cumulative probabilities $G_{2D}(\delta)$ obtained for the radio-isotopes investigated.

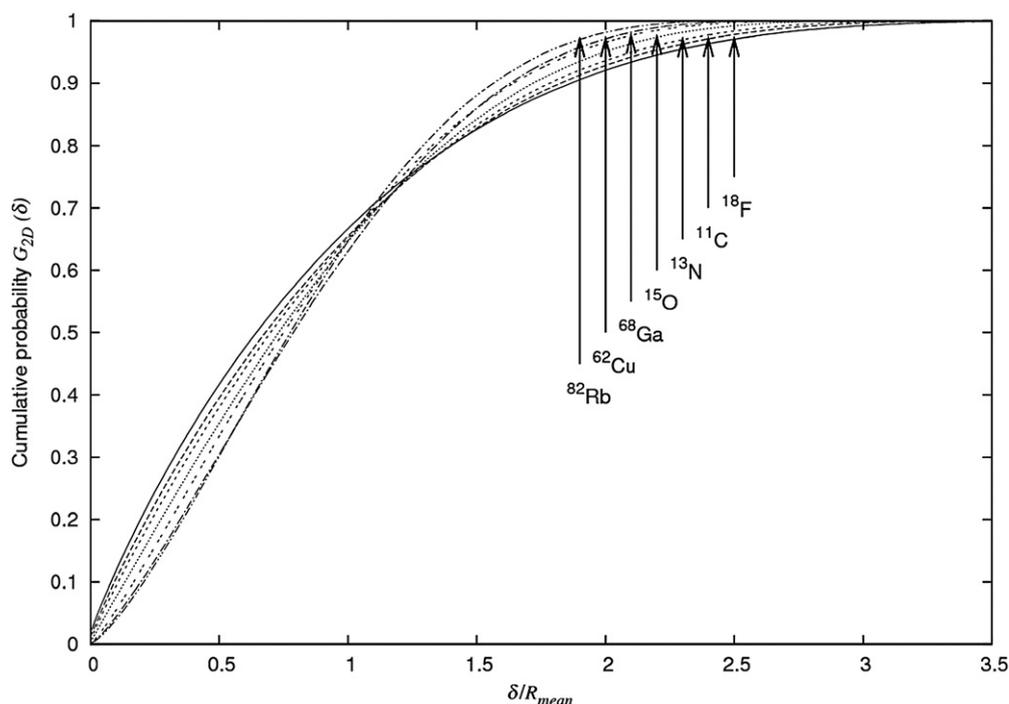


Figure 3. Cumulative probabilities $G_{2D}(\delta)$ versus δ/R_{mean} .

3.2. Empirical estimation of cumulative probability distributions

Despite their similarity, the plots in figure 3 cannot be described by a single curve. Instead, we have for each isotope fitted the cumulative probability curves reported in figure 2 by the following empirical function:

$$\zeta(\delta) = 1 - \exp(-A\delta^2 - B\delta). \quad (4)$$

This form is chosen such that for any positive values of A and B , it will correctly rise monotonously from $\zeta(0) = 0$ towards 1, $\zeta(\infty) = 1$. Furthermore, for any probability $0 \leq \zeta < 1$ considered, the corresponding value of δ can be found as the positive solution to this equation:

$$A\delta^2 + B\delta + \ln(1 - \zeta) = 0. \quad (5)$$

The values obtained for the parameters A and B are reported in table 2.

The parameters A and B obviously depend on isotope. In figure 3, we scaled the curves by the isotope-dependent R_{mean} . For the parameters A and B , we investigated instead dependence of the more easily determined value E_{mean} and found that they could be described as power functions of E_{mean} :

$$A = 0.0266 (E_{mean})^{-1.716} \quad \text{and} \quad B = 0.1119 (E_{mean})^{-1.934}, \quad (6)$$

where E_{mean} is given in MeV, and the units of A and B are mm^{-2} and mm^{-1} , respectively. The variations of A and B with E_{mean} as well as the interpolated power functions are reported in figure 4.

As a simple check of these expressions, we also study the case of ^{52}Fe , a radio-metal generator-produced isotope which emits positrons of relatively low energy, $E_{max} = 803.6$ keV

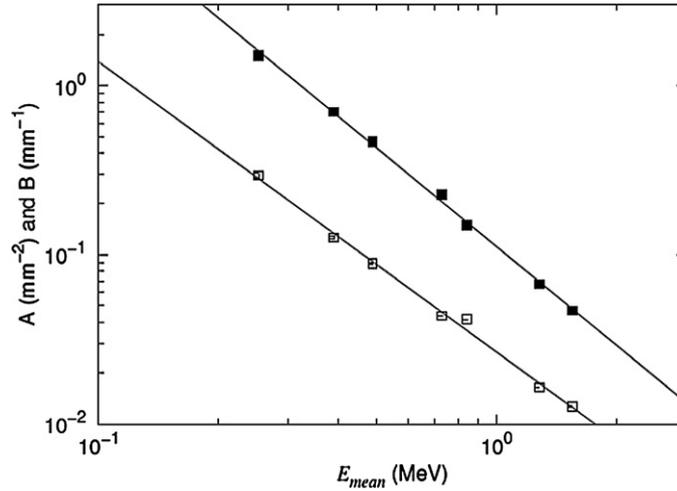


Figure 4. The fitting parameters A and B (open and solid squares, respectively) versus the mean energy of the isotope under consideration.

Table 2. Fitting parameters for the empirical cumulative probability given by (4). The standard errors are given in brackets for each isotope.

Isotopes	A (mm^{-2})	B (mm^{-1})
^{18}F	0.2951 ($\pm 3.6\%$)	1.5090 ($\pm 0.57\%$)
^{11}C	0.1262 ($\pm 1.7\%$)	0.7010 ($\pm 0.45\%$)
^{13}N	0.0885 ($\pm 1.0\%$)	0.4681 ($\pm 0.38\%$)
^{15}O	0.0436 ($\pm 0.54\%$)	0.2266 ($\pm 0.33\%$)
^{68}Ga	0.0414 ($\pm 0.35\%$)	0.1499 ($\pm 0.34\%$)
^{62}Cu	0.0164 ($\pm 0.28\%$)	0.0671 ($\pm 0.40\%$)
^{82}Rb	0.0126 ($\pm 0.23\%$)	0.0468 ($\pm 0.42\%$)

and $E_{\text{mean}} = 344 \text{ keV} = 0.344 \text{ MeV}$. Clinically, ^{52}Fe has been used in haematological studies to follow iron kinetics, but such studies are complicated by the fact that ^{52}Fe decays to another PET isotope, $^{52\text{m}}\text{Mn}$ (Haddad *et al* 2008, Lubberink *et al* 1999). By using (6), we have estimated the fitting parameters as $A = 0.1660 \text{ mm}^{-2}$ and $B = 0.8813 \text{ mm}^{-1}$. Figure 5 shows the calculated $G_{2\text{D}}(\delta)$ for ^{52}Fe along with the empirical function $\zeta(\delta)$ described by these values of A and B .

3.3. Radial probability density distributions

For determination of PSFs, the probability density distribution should be known, either as the area density, $f(x, y) = f(\delta)$, or as the radial density, $g_{2\text{D}}(\delta)$. We here focus on the radial probability density, which can be compared to the result of differentiation of the estimate for cumulated probability, $\zeta(\delta)$ from (4):

$$g_{2\text{D}}(\delta) = \frac{d}{d\delta} G_{2\text{D}} \approx \frac{d\zeta}{d\delta} = (2A\delta + B) \cdot \exp(-A\delta^2 - B\delta). \quad (7)$$

It will be noted that $d\zeta/d\delta$ is normalized to total area 1, since $\zeta(0) = 0$ and $\zeta(\infty) = 1$. The Monte Carlo data are compared with the result of (7) in figure 6.

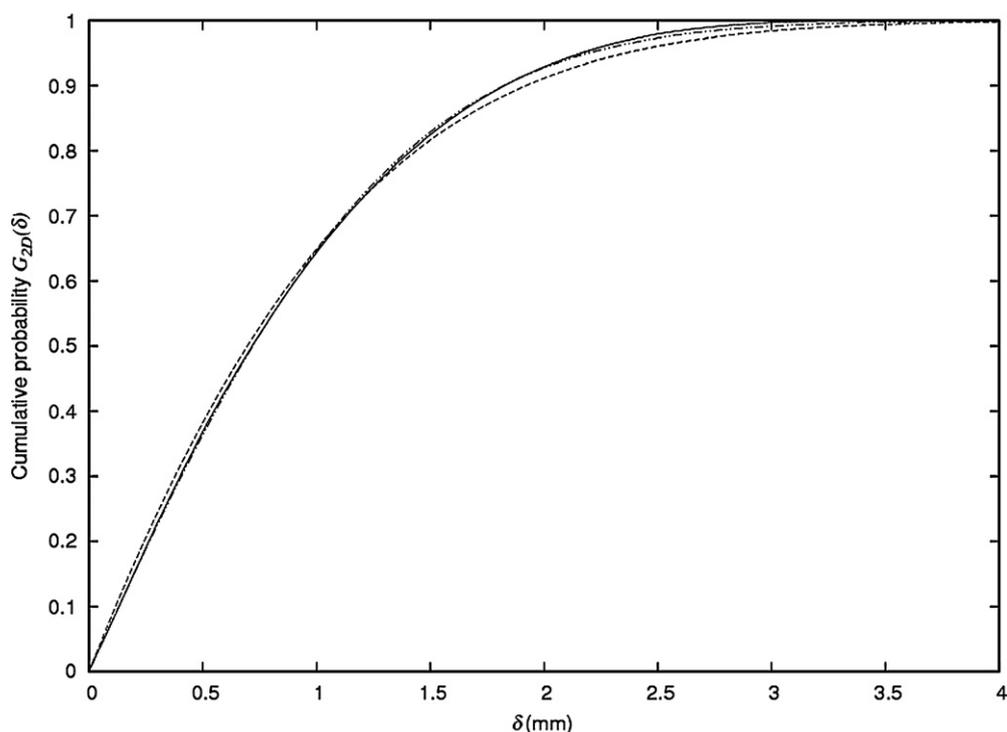


Figure 5. Calculated function $G_{2D}(\delta)$ along with the empirical function $\zeta(\delta)$ from estimated values of A and B for ^{52}Fe (solid and dashed line, respectively). A direct fit to the data is shown as a dot-dash-dot line almost coinciding with the full line.

Table 3. Approximate mean range for two isotopes (chosen to represent low and high energy) calculated with PENELOPE in the continuing slowing down approximation. For soft and lung tissue, the largest difference from water is 1.2% whereas it is up to 13% for bone tissue.

Biological materials (ICRP compositions)		range · density (g cm^{-2})	
Name	Density ρ (g cm^{-3})	^{18}F	^{62}Cu
Water	1.00	0.0622	0.595
Lung	0.26	0.0634	0.597
Adipose	0.98	0.0613	0.591
Muscle	1.07	0.0635	0.602
Bone	1.92	0.0702	0.666

3.4. Effects of variation in biological tissues

The PENELOPE results for the density-scaled positron range in different media are given in table 3. It is seen that soft tissue differs very little from water, while bone tissue deviates by about 13%.

In figure 7, we have reported the cumulative 2D probabilities obtained in PENELOPE for ^{18}F in water, bone and lung. The data are plotted as a function of $\delta \cdot \rho$, with ρ being the density of the biological tissue. The tendency for bone data to have larger distances can be seen as

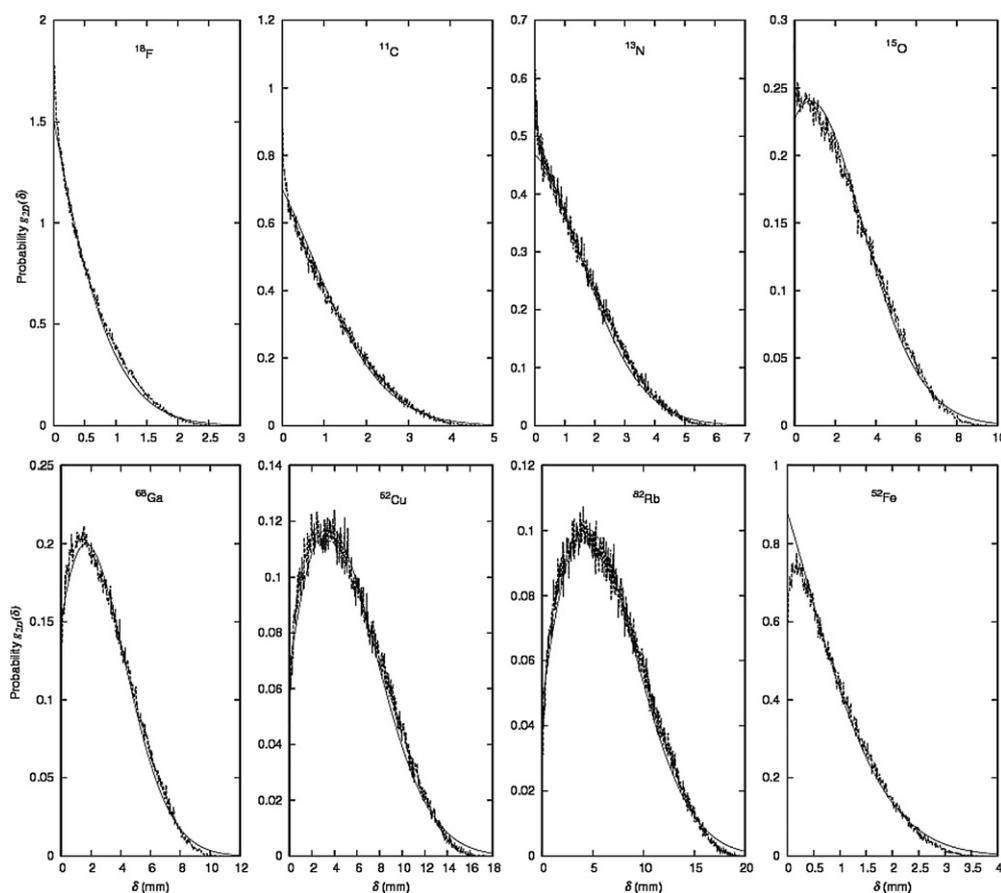


Figure 6. Functions $g_{2D}(\delta)$ taken from Monte Carlo calculations (broken lines) compared with the expression from (7) (smooth lines), using values of A and B from table 2. For ^{52}Fe , the values of A and B from (6) were used. Monte Carlo data are reported with a $10\ \mu\text{m}$ bin for ^{18}F , ^{11}C , ^{13}N and ^{52}Fe , and with a $30\ \mu\text{m}$ bin for ^{15}O , ^{68}Ga , ^{62}Cu and ^{82}Rb .

the bone curve being slightly below the other two curves in the upper half of the figure, but overall the density-corrected distributions are very similar for all three media.

4. Discussion

4.1. Cumulative and differential 2D probability distributions

As noted in the introduction, the choice of 2D distributions is very relevant when considering measurements by individual detector pairs. The cumulative distribution $G_{2D}(\delta)$ shows us that for all investigated isotopes, almost two-third of the annihilations take place within $\delta \leq R_{\text{mean}}$ (see figure 3), meaning that R_{mean} can be used as a rough estimate of the expected broadening due to the positron range.

When based on Monte Carlo data, rather than mathematical functions, the cumulative (integral) distribution is more robust than the differential distribution. But a reconstruction algorithm involving modelling of the positron range will typically need the differential

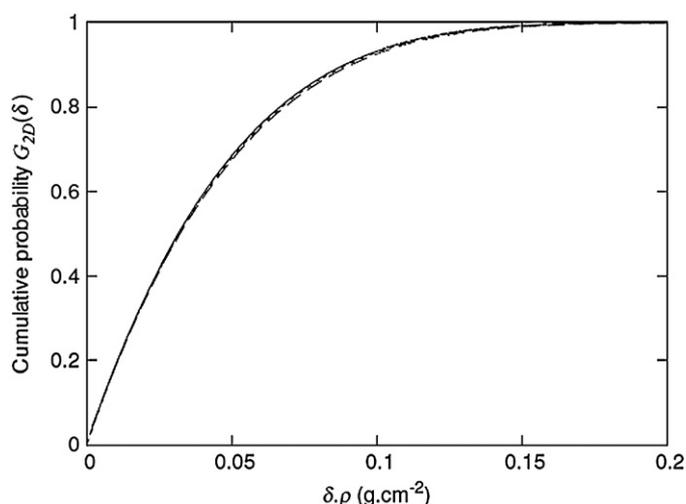


Figure 7. Cumulative probability for water (solid line), bone (dash line) and lung (dotted line) as a function of $\delta \cdot \rho$. All three curves are based on PENELOPE results.

distribution, either as area density $f(\delta)$ or radial density $g_{2D}(\delta)$. As demonstrated in figure 6, the radial distributions can be well approximated by using (7) with the values of A and B from table 2. If A and B are determined from the simple, empirical relations (6), then the distribution will of course be less precise, but the curves for ^{52}Fe in figures 5 and 6 indicate that such distributions can be used as the first approximation for other allowed-decay isotopes than those in table 2.

Our focus on the radial density has the advantage of avoiding the very peaked (cusp-shaped) distributions found for both 1D (Derenzo 1979) and 2D (Sánchez-Crespo *et al* 2004) non-radial distributions. These peaks are so sharp that the peak height becomes dependent on the details of the calculations (e.g., bin size), meaning that measures dependent on peak height (such as FWHM) do not have a strict meaning (Levin and Hoffman 1999).

In fact, our own results indicate that the radial distribution $g_{2D}(\delta)$ does not necessarily go to zero for $\delta \rightarrow 0$ (see figure 6), i.e. the area distribution $f(\delta) = g_{2D}(\delta)/(2\pi\delta)$ may diverge for $\delta \rightarrow 0$, in which case FWHM is meaningless. Note that such a divergence is not unphysical as long as the area under the singularity is finite. For example, a simple harmonic oscillator, $x = A \sin(\omega t)$, will have a density distribution for x which diverges at $x = \pm A$, because velocity is zero in these positions. In our case, g_{2D} can be integrated into G_{2D} , with the (physically correct) implication that only a finite number of positrons will be detected near $\delta = 0$.

It can be argued against the form (4) for the cumulative distribution $G_{2D}(\delta)_{\text{estimate}} = \zeta(\delta)$ that it never reaches 1, and therefore the differential distributions $g_{2D}(\delta)_{\text{estimate}} = d\zeta/d\delta$ never fall to 0, despite positrons having a maximum range. The effect of this can be seen in figure 6, where the final part of the curves $g_{2D}(\delta)_{\text{estimate}}$ tend to be slightly above the Monte Carlo data, especially for the high-energy isotopes. Similar objections could however be raised against describing positron range distributions by exponentials (Derenzo 1979) or Gaussian functions (Palmer and Brownell 1992). Mathematically, it can be seen that $d\zeta/d\delta$ will eventually approach the zero value faster than a Gaussian function: $d\zeta/d\delta$ can be considered as the product of a Gaussian, $\exp(-A\delta^2)$, and a factor that goes towards zero for large distances, $(2A\delta + B) \cdot \exp(-B\delta)$, possibly after an initial rise. If a cutoff distance δ_{cutoff} is introduced,

setting $g_{2D}(\delta)_{\text{estimate}} = 0$ for $\delta > \delta_{\text{cutoff}}$, then the area under the curve will then be slightly less than 1, namely $\zeta(\delta_{\text{cutoff}})$. A possible choice for δ_{cutoff} can be R_{max} which can be estimated from E_{mean} as a linear function, based on table 1 (fit not shown).

In short, our formulation based on A and B is suitable for applications dependent on the whole distribution (such a de-blurring), while it is less suitable or unsuitable for applications sensitive to the behaviour of a small fraction of the positrons (such as the determination of maximal distances). Figure 7 indicates that the same values of A and B can be used for different media if distances are scaled by density, as has already been proposed by Lehnert *et al* (2011) for a 1D distribution model.

4.2. Limitations

The current study was made only for allowed-decay isotopes. Non-allowed-decay isotopes can have other relations between E_{mean} and spectrum shape, meaning that the empirical relation (6) cannot be expected to give usable results for non-allowed-decay isotopes. As an example, we tried it for ^{124}I (data not shown), which is non-allowed decay, and found large discrepancies from expected $G_{2D}(\delta)$.

5. Conclusion

Nowadays, it is well known that when high-energy positron emitters are used in PET scanning, the positron range adds to resolution degradation. In the major part of existing studies, this degradation is related to the positron range (r). In this work, we have proposed not to use the positron range but instead the shortest distance (δ) between the point of emission and the LOR. Annihilation point radial 2D density distributions as well as cumulated probabilities for a series of medically relevant PET isotopes were provided by means of Monte Carlo simulation. Empirical expressions of these distributions were then proposed for the allowed-decay PET isotopes investigated here.

These results allow an easy estimation of the percentage of annihilations occurring within a given distance and may give approximate density distributions for use in reconstruction algorithms taking the positron range into account.

References

- Blanco A 2006 Positron range effects on the spatial resolution of RPC-PET *IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.* pp 2570–3
- Brawley S J, Armitage S, Beale J, Leslie D E, Williams A I and Laricchia G 2010a Electron-like scattering of positronium *Science* **330** 789
- Brawley S J, Williams A I, Shipman M and Laricchia G 2010b Resonant scattering of positronium in collision with CO_2 *Phys. Rev. Lett.* **105** 263401
- Cal-González J, Herraiz J L, España S, Corzo P M G and Udías J M 2011 A general framework to study positron range distributions *IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.* pp 2733–7
- Cal-González J, Herraiz J L, España S, Desco M, Vaquero J J and Udías J M 2009 Positron range effects in high resolution 3D PET imaging *IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.* pp 2788–91
- Cal-González J, Herraiz J L, España S, Desco M, Vaquero J J and Udías J M 2010 Validation of PeneloPET positron range estimations *IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.* pp 2396–9
- Champion C 2003 Theoretical cross sections for electron collisions in water: structure of electron tracks *Phys. Med. Biol.* **48** 2147–68
- Champion C and Le Loirec C 2006 Positron follow-up in liquid water: I. A new Monte Carlo track-structure code *Phys. Med. Biol.* **51** 1707–23
- Champion C and Le Loirec C 2007 Positron follow-up in liquid water: II. Spatial and energetic study for the most important radioisotopes used in PET *Phys. Med. Biol.* **52** 6605–25

- Champion C, Le L C and Stosic B 2012 EPOTRAN: a full-differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid and gaseous water *Int. J. Radiat. Biol.* **88** 54–61
- Cho Z H, Chan J K, Ericksson L, Singh M, Graham S, MacDonald N S and Yano Y 1975 Positron ranges obtained from biomedically important positron-emitting radionuclides *J. Nucl. Med.* **16** 1174–6
- Derenzo S E 1979 Precision measurement of annihilation point spread distributions for medically important positron emitters *Positron Annihilation* ed R R Hasiguti and K Fuliwara (Sendai, Japan: The Japan Institute of Metals) pp 819–23
- Derenzo S E 1986 Mathematical removal of positron range blurring in high-resolution tomography *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **33** 565–9
- Haddad F, Ferrer L, Guertin A, Carlier T, Michel N, Barbet J and Chatal J F 2008 ARRANAX, a high-energy and high-intensity cyclotron for nuclear medicine *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging* **35** 1377–87
- Krane K S 1988 *Introductory Nuclear Physics* (New York: Wiley)
- Le Loirec C and Champion C 2007 Track structure simulation for positron emitters of medical interest: part I. The case of the allowed decay isotopes *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **582** 644–53
- Lehnert W, Gregoire M C, Reilhac A and Meikle S R 2011 Analytical positron range modelling in heterogeneous media for PET Monte Carlo simulation *Phys. Med. Biol.* **56** 3313–35
- Levin C S and Hoffman E J 1999 Calculation of positron range and its effect on the fundamental limit of positron emission tomography system spatial resolution *Phys. Med. Biol.* **44** 781–99
- Lubberink M, Tolmachev V, Beshara S and Lundqvist H 1999 Quantification aspects of patient studies with Fe-52 in positron emission tomography *Appl. Radiat. Isot.* **51** 707–15
- Palmer M R and Brownell G L 1992 Annihilation density distribution calculations for medically important positron emitters *IEEE Trans. Med. Imaging* **11** 373–8
- Partridge M, Spinelli A, Ryder W and Hindorf C 2006 The effect of β^+ energy on performance of a small animal PET camera *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **568** 933–6
- Qi J Y, Leahy R M, Cherry S R, Chatziioannou A and Farquhar T H 1998 High-resolution 3D Bayesian image reconstruction using the microPET small-animal scanner *Phys. Med. Biol.* **43** 1001–13
- Rahmim A, Tang J, Lodge M A, Lashkari S, Ay M R, Lautamaki R, Tsui B M W and Bengel F M 2008 Analytic system matrix resolution modeling in PET: an application to Rb-82 cardiac imaging *Phys. Med. Biol.* **53** 5947–65
- Ruangma A, Bai B, Lewis J S, Sun X K, Welch M J, Leahy R and Laforest R 2006 Three-dimensional maximum *a posteriori* (MAP) imaging with radiopharmaceuticals labeled with three Cu radionuclides *Nucl. Med. Biol.* **33** 217–26
- Salvat F, Fernández-Varea J M and Sempau J 2006 PENELOPE—A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport (Issy-les-Moulineaux: OECD Nuclear Energy Agency)
- Sánchez-Crespo A, Andreo P and Larsson S A 2004 Positron flight in human tissues and its influence on PET image spatial resolution *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging* **31** 44–51
- Venkataramaiah P, Gopala K, Basavaraju A, Suryanarayana S S and Sanjeeviah H 1985 A simple relation for the Fermi function *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **11** 359–64

Chapitre 5

L'imagerie de demain au service de la thérapie

L'or étant un excellent absorbeur de rayons X, son utilisation sous forme de GNP comme agent renforceur au sein des tumeurs dans le cadre de traitements par radiothérapie constitue une piste prometteuse. Le contrôle de la dose déposée lors de tels traitements nécessite des méthodes d'imagerie moléculaire offrant une résolution spatiale et énergétique élevée. La tomographie par rayons X de fluorescence ou XFCT¹ est basée sur la détection des photons de fluorescence émis lorsqu'un matériau de Z élevé est excité. Des études ont montré que cette méthode offrait une bonne sensibilité pour de faibles concentrations de traceur et était à même de produire des images permettant la quantification de la concentration de GNP incluses dans un fantôme anthropomorphe. Des essais préliminaires d'imagerie de fluorescence ont été effectués sur les installations du Département Imagerie et Simulation pour le Contrôle (DISC) du Laboratoire d'Intégration des Systèmes et Technologies de la Direction de la Recherche Technologique du CEA Saclay (DRT/LIST) avec le détecteur Caliste HD développé par le Laboratoire Spectro-Imageurs pour le Spatial (LSIS) de l'Institut de recherche sur les lois fondamentales de l'Univers (Irfu) du CEA Saclay. Un fantôme anthropomorphe correspondant à la tête d'un enfant de 5 ans a été irradié à l'aide d'un tube à rayons X opérant à une tension de 120 kVp. Une feuille d'or de masse 1 % de la masse de la tumeur a été placée à l'intérieur du fantôme. La soustraction des spectres obtenus en présence puis en l'absence de cette feuille d'or a permis de faire ressortir très clairement les pics de fluorescence de l'or. L'article reproduit ici détaille cette étude qui a été poursuivie par le projet SATBOT(<http://www.cea.fr/drf/Pages/Actualites/Endirect-des-labos/2019/Satbot-le-plus-beau-des-detecteurs.aspx>) dont l'objectif est de continuer les essais d'irradiation d'un fantôme anthropomorphe sur les équipements de la plateforme GERIM 2 (Grand Equipement de Recherche pour l'Instrumentation Multi-capteurs) du DISC. Les principaux enjeux de ce projet sont l'optimisation des conditions d'acquisition ainsi que la quantification des images obtenues dans le but de vérifier la dose délivrée au patient. La plateforme GERIM 2 intégrant 2 robots 6 axes (chacun des robots portant respectivement un tube X et un détecteur), elle permettra de tester des configurations de type CyberKnife².

1. X-ray Fluorescence Computed Tomography

2. Accélérateur de particule miniaturisé et monté sur un bras robotique. Première et seule machine de radiothérapie stéréotaxique robotisée. Grâce à son système d'imagerie embarqué, elle permet de suivre en temps réel la tumeur, y compris pendant la respiration du patient. Dans certains cas, l'implantation de fiduciels (guide radio-opaques) dans le volume cible est nécessaire avant le traitement.

IMAGE-GUIDED TREATMENT USING AN X-RAY THERAPY UNIT AND GOLD NANOPARTICLES: TEST OF CONCEPT

Cindy Le Loirec*, Dominique Chambellan and David Tisseur
CEA, LIST, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

*Corresponding author: cindy.le-loirec@cea.fr

Gold nanoparticles (GNPs) have the potential to enhance the radiation dose locally in conjunction with kV X-rays used for radiation therapy. As for other radiotherapy modalities, the absorbed dose needs to be controlled. To do that, it is an advantage to know the distribution of GNPs. However, no effective imaging tool exists to determine the GNP distribution *in vivo*. Various approaches have been proposed to determine the concentration of GNPs and its distribution in a tumour and in other organs and tissues. X-ray fluorescence computed tomography (XFCT) is a promising imaging technique to do that. A new experimental device based on the XFCT technique allowing the *in vivo* control of GNP radiotherapy treatments is proposed. As a test of concept, experimental acquisitions and Monte Carlo simulations were performed to determine the performance that a XFCT detector has to fulfil.

INTRODUCTION

Contrast agents with high atomic number, such as gold nanoparticles (GNPs), have the potential to enhance the radiation dose locally in external radiotherapy with kV X-rays. In the kilovoltage region, gold has an attenuation coefficient two orders of magnitude greater than that of soft tissue. So, even a small amount of GNPs allows a dose enhancement inside the tumour volume by sparing surrounding normal tissue provided that the GNP concentration is lower there. The greatest ratio between the absorption coefficient of gold and that of soft tissue is found near 40–50 keV. However, the use of such energies for treatment would be complicated by the high absorption in tissue. Therefore, X-rays of higher energies, near the gold K-edge (80.7 keV), are usually used. Several developments have already been performed with monoenergetic beams around the gold K-edge, using synchrotron radiation, but that technique is not useful in a clinical context. Instead, more traditional X-ray production methods are considered with some refinements in the filtration to optimise the photon energy distribution of the beam⁽¹⁾.

One of the key tasks during preclinical studies of such a treatment method is to determine the biodistribution of GNPs injected into animals. Indeed, the K_{α} fluorescent X-ray energies of gold (66.99 and 68.80 keV) are both able to escape a body when produced by polychromatic X-rays^(2, 3). However, it has been noted^(4, 5) that the following three technical challenges are yet to be met satisfactory to perform *in vivo* quantification of GNPs:

- Goal 1: imaging of GNPs distributed within the tumour and critical organs,
- Goal 2: quantification of the amount of GNPs present,

- Goal 3: achieving system sensitivity capable of detecting GNP concentration typically found in tumours.

X-ray fluorescence computed tomography (XFCT) has shown the potential to overcome these challenges by providing GNP images as well as concentration information^(4, 6–8). XFCT imaging of GNP-loaded phantoms has been performed using K X-ray fluorescence (K-XRF) in gold⁽⁴⁾. However, relatively high GNP concentrations were tested by the system. Simulation studies comparing X-ray fluorescence CT and K-edge CT show that fluorescence imaging can provide a better sensitivity for very low tracer concentration⁽⁹⁾.

The development of a new experimental device based on the XFCT technique and allowing *in vivo* control of GNP radiotherapy treatments is now proposed. As a test of concept, in a first step the X-ray tube and the detector used at the authors' institute for non-destructive testing were used. In parallel, Monte Carlo (MC) simulations performed with PENELOPE were used; on one hand, as an optimisation tool to enhance the experimental set-up, and on the other hand, as a planning system to estimate the GNP concentration needed to treat tumours.

MATERIALS AND METHODS

Experimental set-up

The proposed system (Figure 1) was configured according to the experimental set-up reported by MacMahon *et al.*⁽¹⁰⁾ and consisted of a polychromatic X-ray source (125 kVp, 300 μ A), a 6 mm diameter collimator, a spectrometer system (XR 100T-CdTe, Amptek, Inc., USA), a multichannel analyser (Novelec SM-1024) and a phantom.

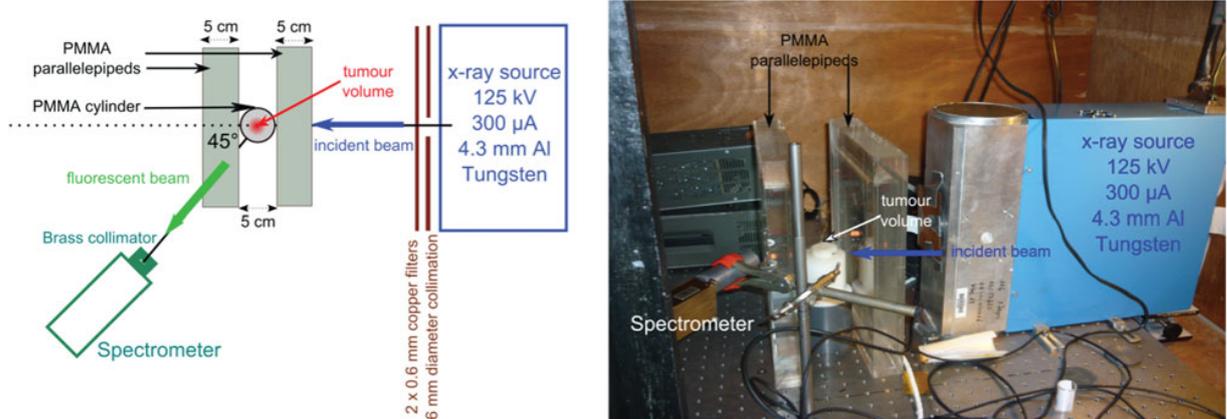


Figure 1. Experimental set-up: the tumour volume is placed on the PMMA cylinder and between the two PMMA inserts and the incident beam is impinging perpendicularly on them. The spectrometer is placed at 135° from the incident beam.

The XR 100T-CdTe was a thermoelectrically cooled $5 \times 5 \times 1 \text{ mm}^3$ CdTe diode X-ray detector and preamplifier. Its energy resolution was $\sim 1.5 \text{ keV}$ (FWHM) at 150 keV and 0.6 keV at 59.54 keV (^{241}Am source). It had high detection efficiency up to 100 keV, which made it ideal for XRF applications. Its calibration was performed with a metallic sheet of pure gold (99 %).

The phantom was composed of two PMMA parallelepipeds of 5 cm thickness mimicking the healthy tissue and a cylindrical ‘tumour’ volume of 5 cm diameter, positioned between the two PMMA parallelepipeds and in the intersection of the incident and detected beams. The tumour volume was made of PMMA. It had a small hole into which a sheet of pure gold of 1 mm height and 25 mm diameter was inserted. The dimensions of the sheet were chosen to obtain a concentration of gold in the tumour volume equivalent to 10 mg Au g^{-1} of tumour.

Several strategies were applied to effectively minimise the unwanted background in the registered pulse-height distributions: (i) two 0.6-mm-thick copper filters were placed at the exit of the collimated beam to reduce the unnecessary X-rays with energies below gold K-edge energy (80.7 keV), (ii) the spectrometer was positioned at 135° to the incident X-ray beam to minimise the impact of the tungsten peaks and of the Compton scattered X-rays in the region of the Au peaks, and (iii) a brass collimator with an opening of 6 mm diameter was placed to cover the sensitive element of the spectrometer in order to receive the directional beam while improving the signal-to-noise ratio.

A first measurement was acquired with gold and without any PMMA phantom to detect the gold peaks and to calibrate the spectrometer’s energy scale. A second measurement was performed with the PMMA inserts and the tumour volume without gold. A third measurement was performed with the PMMA inserts and the tumour cylindrical volume

with gold. The three measurements lasted 10 min at $300 \mu\text{A}$.

MC simulations

Simulations were performed with the 2006 version of PENELOPE⁽¹¹⁾. An RQR10 spectrum^(12, 13) was simulated with a 0.95° aperture. The simulated geometry corresponded to the experimental set-up. A brass collimator with a 6 mm diameter opening was placed on the beam axis, and all the photons emerging it were registered to build an energy spectrum. The same brass collimator was also positioned at 45° from the beam axis, and the photons emerging it were also registered.

A second simulation was performed with the same parameters, except that the tumour cylinder was replaced by water.

RESULTS

Experimental results

Figure 2 shows the spectra obtained with and without any gold sheet in the tumour volume. Both spectra present a Compton scattering front between 62 and 66 keV. The K_β peaks of tungsten are visible at 67.2 and 69.1 keV for the ‘PMMA spectrum’ and the Au K_α peaks can be detected at 67.0 and 68.8 keV for the ‘Gold + PMMA spectrum’. The difference between both spectra is plotted in the second panel of Figure 2. Au peaks are hardly detected due to the high background level.

Simulated results

Spectra simulated with and without gold in the tumour volume are reported in Figure 3. The difference between the two simulated spectra is shown in

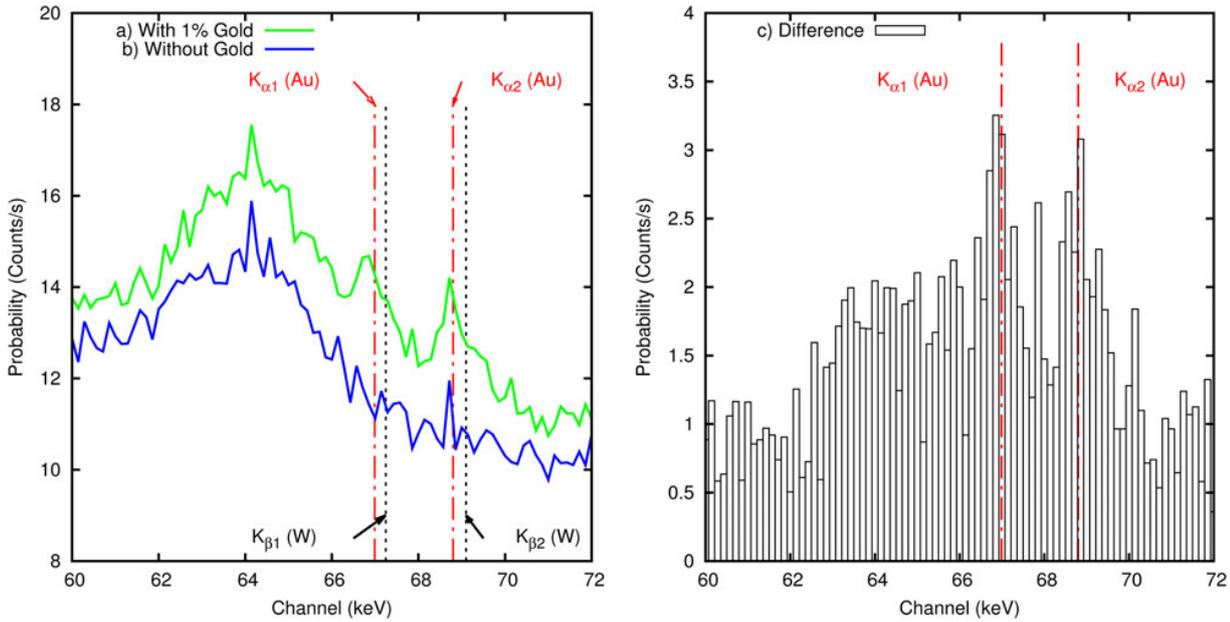


Figure 2. In the first panel, experimental spectra obtained with (a) and without (b) gold inserted into the small cylindrical phantom are plotted. In the second panel, the difference between the two spectra is plotted. The dashed and dotted lines indicate the K_{α} X-ray energies of gold (66.99 and 68.80 keV) and the dotted lines the K_{β} X-ray energies of tungsten (67.244 and 69.1 keV).

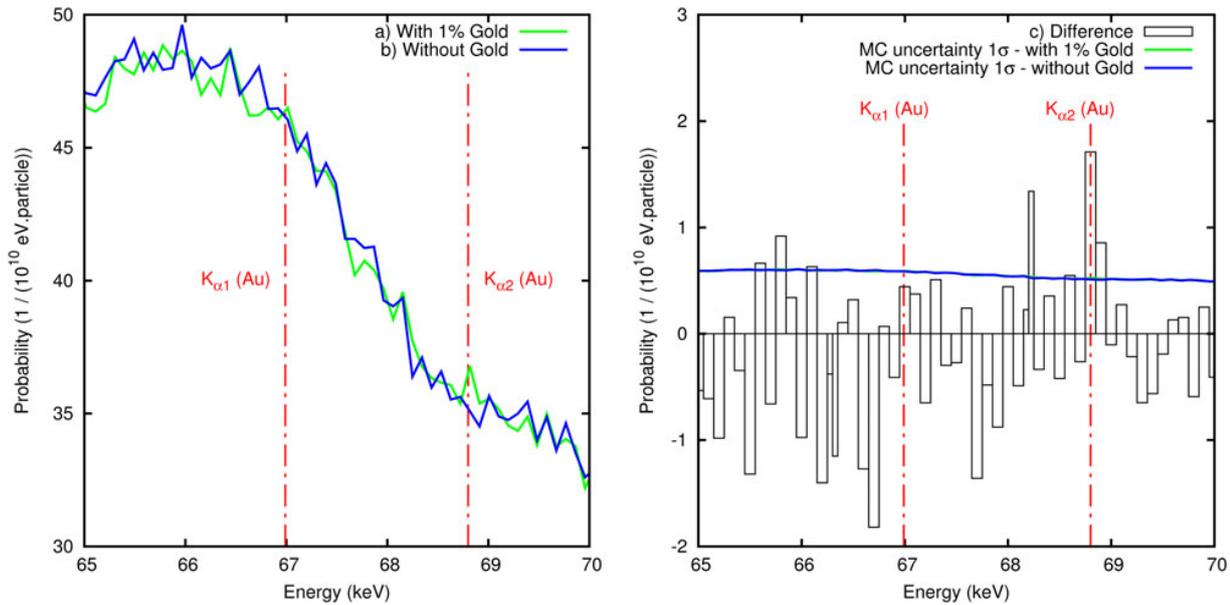


Figure 3. Simulated spectra obtained with (a) and without gold (b) inserted into the small cylindrical phantom. In the second panel, the difference between the two spectra is plotted. The dashed and dotted lines indicate the K_{α} fluorescent X-ray energies of gold (66.99 and 68.80 keV).

the second panel of Figure 3. It shows a very good discrimination of the Au $K_{\alpha 2}$ peak, due to the better energy resolution used in the MC simulation and to the absence of background induced by the detector. However, the Au $K_{\alpha 1}$ peak is hardly detectable, probably being inferior due to the MC uncertainty.

DISCUSSION

This pilot study has been performed for one experimental and one simulated configuration. The results show that gold peaks are not easily detected because their contribution is mixed with tungsten K_{α} peaks,

phantom Compton scattering and interactions in the detector. It has been shown⁽¹⁰⁾ that an optimisation of the beam filtration can be performed to optimise the spectral shape of the excited source and increase the sensitivity. Moreover, the detector position has also to be tested in order to find the most suitable detection set-up. Scattered X-rays can be minimised by using a backscatter detector orientation⁽¹⁴⁾. Further simulations will be performed to determine the experimental set-up that is most suitable for application in the present study. To improve the simulation, the detector model will be integrated into the simulation to analyse its impact on the Au peaks detection.

Moreover, in a first step, the authors' laboratory detector usually used for applications in non-destructive testing was used to check the feasibility of the method. However, the energy resolution of this one is too bad (1.5 keV at 150 keV) to allow a good discrimination of the gold peaks in the Compton background. A better energy resolution is needed to allow a good discrimination of the Au peaks.

In the future, the authors plan to test the performance of a detector initially developed in their institute for Astrophysics^(15, 16). This is an imaging spectrometer (CALISTE HD), which uses a 1-mm-thick Schottky CdTe detector divided into 256 pixels disposed in a 16×16 matrix with a pixel pitch of 625 μm . It has been tested with a ^{241}Am source, and excellent spectroscopic performance was obtained, in particular between 10 and 100 keV (0.56 and 0.67 keV FWHM at 13.9 and 59.5 keV, equivalent to 4 and 1.1 % energy resolution, respectively). A better energy resolution (~ 0.52 keV at 59.5 keV) can be attained for the present application after a finer calibration step and a reduction of the electronic noise.

CONCLUSION

Measurements performed during this study prove the feasibility to detect Au peaks in GNP radiotherapy treatments. The MC simulations show that a detector with a better energy resolution than the one used during this study is needed to get a good discrimination of the peaks. Other parameters of the detector have also to be taken into account, such as the calibration process, the scattering interactions into the elements of the detector, the pile-up effect and the dead-time to minimise the background visible in Figure 2. A more detailed MC simulation taking into account the geometry of the detector could provide useful information to characterise the ideal detector. Experimental acquisitions will thus be conducted with a better energy resolution detector developed initially for astrophysical applications. In parallel, MC simulations will be performed to optimise the experimental set-up and quantify the performance of the detector.

REFERENCES

1. Ricketts, K., Castoldi, A., Guazzoni, C., Ozkan, C., Christodoudou, C., Gibson, A. P. and Royle, G. J. *A quantitative x-ray detection system for gold nanoparticle tumour biomarkers*. *Phys. Med. Biol.* **57**, 5543–5555 (2012).
2. Popovtzer, R., Agrawal, A., Kotov, N. A., Popovtzer, A., Balter, J., Carey, T. E. and Kopelman, R. *Targeted gold nanoparticles enable molecular CT imaging of cancer*. *Nano Letters* **8**, 4593–4596 (2008).
3. Lee, T. Y. *Functional CT: physiological models*. *Trends Biotechnol.* **20**(Suppl.), S3–S10 (2002).
4. Cheong, S. K., Jones, B. L., Siddiqi, A. K., Liu, F., Manohar, N. and Cho, S. H. *X-ray fluorescence computed tomography (XFCT) imaging of gold nanoparticle-loaded objects using 110 kVp x-rays*. *Phys. Med. Biol.* **55**, 647–662 (2010).
5. Ricketts, K., Guazzoni, C., Castoldi, A., Gibson, A. P. and Royle, G. J. *An x-ray fluorescence imaging system for gold nanoparticle detection*. *Phys. Med. Biol.* **58**, 7841–7855 (2013).
6. Schlomka, J. P. *et al.* *Experimental feasibility of multi-energy photon counting K-edge imaging in pre-clinical computed tomography*. *Phys. Med. Biol.* **53**, 4031–4047 (2008).
7. Takeda, T., Wu, J., Thet-Thet-Lwin, Huo, Q., Yuasa, T., Hyodo, K., Dilmanian, F. A. and Akatsuka, T. *X-ray fluorescent CT imaging of cerebral uptake of stable-iodine perfusion agent iodoamphetamine along analog IMP in mice*. *J. Synchrotron Radiat.* **16**, 57–62 (2009).
8. Jones, B. and Cho, S. *The feasibility of polychromatic cone-beam x-ray fluorescence computed tomography (XFCT) imaging of gold nanoparticle-loaded objects: a Monte Carlo study*. *Phys. Med. Biol.* **56**, 3719–3730 (2011).
9. Bazalova, M., Kuang, Y., Prax, G. and Xing, L. *Investigation of x-ray fluorescence computed tomography (XFCT) and K-edge imaging*. *IEEE Trans. Med. Imaging* **31**, 1620–1627 (2012).
10. McMahon, S. J., Mendenhall, M. H., Jain, S. and Currell, F. *Radiotherapy in the presence of contrast agents: a general figure of merit and its application to gold nanoparticles*. *Phys. Med. Biol.* **53**, 5635–5651 (2008).
11. Salvat, F., Fernández-Varea, J. M. and Sempau, J. *PENELOPE-2006, A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. OECD ISBN 92-64-02301-1, Barcelona, Spain (2006).
12. Oliveira, P. M. C., Squair, P. L., Nogueira, M. S. and da Silva, T. A. *Uniformity and field size of filtered x-ray beams*. In: *Proceedings of the 2007 International Nuclear Atlantic Conference – INAC 2007*, Santos, ABEN (2007).
13. Oliveira, P. M. C., da Silva, T. A., Baptista, A. T. and Pereira, E. G. *On implementing reference radiations for calibrating and testing solid state detectors for dose measurements in radiology*. In: *Proceedings of the 15th International Conference on Solid State Dosimetry*, Delft Technology University (2007).
14. Ahmad, M., Bazalova, M., Xiang, L. and Xing, L. *Order of magnitude sensitivity increase in x-ray fluorescence computed tomography (XFCT) imaging with an optimized spectro-spatial detector configuration: theory*

IGRT WITH HEAVY ELEMENTS

- and simulation*. IEEE Trans. Med. Imaging **33**, 1119–1128 (2014).
15. Meuris, A. *et al.* *Caliste-SO, a CdTe based spectrometer for bright solar event observations in hard X-rays*. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A **787**, 72–77 (2015).
16. Dubos, S., Lemaire, H., Schaune, S., Limousin, O., Carrel, F., Schoepff, V. and Blondel, C. *ORIGAMIX, a CdTe-based spectro-imager development for nuclear applications*. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A **787**, 302–307 (2015).

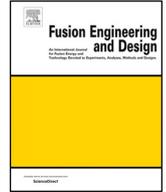
Chapitre 6

Support à l'analyse FMECA pour la hotte de transfert de ITER

Le processus d'ingénierie des systèmes commence par la découverte des problèmes réels qui doivent être résolus et l'identification des défaillances qui sont les plus probables ou/et qui ont l'impact négatif le plus élevé pendant le cycle de vie d'un projet. L'ingénierie des systèmes consiste à trouver des mesures de limitation pour ces problèmes les plus critiques. Cette démarche est mise en oeuvre dans le développement de la machine ITER.

La disponibilité opérationnelle d'ITER dépendra fortement de la durée de maintenance des composants internes : cassettes du divertor, modules de couverture et bouchons. Ces composants faisant face au plasma seront fortement activés par les neutrons et/ou contaminés par le tritium, de sorte qu'ils devront être déplacés à l'aide d'une hotte de transfert télémanipulée (CPRHS pour Cask Plug Remote Handling System) de/vers la Port Cell vers/depuis la cellule chaude pour être réparés ou remplacés. Une analyse FMECA (Failure Mode, Effects and Criticality Analysis) intégrant certains aspects d'une analyse de sûreté a été effectuée pour évaluer la fiabilité du CPRHS. Étant donné que les fûts ITER ne seront pas blindés, l'accès humain sera interdit dans les zones de trajectoire et, en cas de défaillance des fonctions du système de télémanipulation CPRHS, les opérations de sauvetage devront être menées à distance. Les modes de défaillance potentiels pouvant être graves en termes de temps de réparation, un inventaire des pannes de fonction du CPRHS et une analyse des risques ont été effectués à chaque étape du processus de maintenance.

Dans le cadre de cette étude, la contamination éventuelle du CPRHS par des poussières activées résiduelles lors du transport de composants de la cuve à vide a été analysée. Comme le CPRHS n'est pas blindé, la poussière activée résiduelle peut entraîner un débit de dose résiduelle autour du CRPHS. Afin d'évaluer le risque d'exposition externe en cas d'intervention humaine à des fins d'entretien à l'intérieur ou à proximité du CPRHS, des estimations du débit de dose ont été effectuées autour et à l'intérieur du CPRHS pour plusieurs configurations initiales de poussière avec la valeur normalisée de 1 g de poussière activée résiduelle. Les résultats de cette étude constituent une base de données dosimétriques et peuvent aider ITER Organization à définir un niveau de décontamination et un plan de maintenance.



ITER transfer cask: Preliminary assessment of dose rate due to dust remained in the cask



C. Le Loirec^{a,*}, Y. Penelieu^a, C. Lacroix^b, M. Soldaini^c, D. van Houtte^c, J.P. Friconneau^d

^a CEA, DEN, Cadarache, DER, SPRC, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

^b CEA, DEN, Cadarache, DEC, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

^c CEA, DRF, Cadarache, IRFM, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

^d ITER Organization, Route de Vinon-sur-Verdon, CS 90 046, 13067 St Paul Lez Durance Cedex, France

ARTICLE INFO

Keywords:

Remote handling
Dust
TRIPOLI-4^{*}
DARWIN
Dose rate

ABSTRACT

The Remote Handling tasks scheduled during the ITER maintenance shut-down require transportation of in-vessel components and remote-handling tools from the Vacuum Vessel (VV) ports to the Hot Cell Building (HCB). These components and tools will be moved using the Cask and Plug Remote Handling System (CPRHS).

During plasma operations, plasma facing components will be highly activated by neutrons and/or contaminated with tritium. After plasma operations, activated dust will be removed from the VV but some amounts will remain. Therefore, the CPRHS may be contaminated by residual activated dust due to the transportation of these components between the VV and the HCB. As the CPRHS is not shielded, residual activated dust may lead to a residual dose rate around the CPRHS.

To assess the risk of external exposition in case of human intervention for maintenance purpose inside or close to the CPRHS, dose rate estimations were performed around and inside the CPRHS for several initial dust configurations with the normalized value of 1 g of residual activated dust. The results of this study constitute a dosimetric data base and may support ITER Organization in the definition of a decontamination level and maintenance plan.

1. Introduction

The Remote Handling (RH) tasks scheduled during the ITER maintenance shutdown require transportation of in-vessel components and RH tools from the Vacuum Vessel (VV) ports to the Hot Cell Building (HCB). These components and tools will be moved using the Cask and Plug Remote Handling System (CPRHS). The CPRHS is a vital element in the successful performance of ITER. Its design and development must be planned and executed effectively to ensure the CPRHS is fit for purpose [1].

The CPRHS system comprises the following means [2–4]:

- the cask envelope system (CES) is designed to provide a confinement barrier but no shielding protection is associated with this system,
- the cask transport system (CTS) is designed to provide means for remote transportation and navigation of CES,
- the cask docking station system (CDSS) is designed to provide means to mechanical support and align the CES,
- the in-cask plug handling system (ICPHS) is designed to provide means to guide RH components during installation and removal.

During plasma operations, plasma facing components such as plugs, will be highly activated by neutrons and/or contaminated with tritium. After plasma operations, activated dust will be removed from the VV but trace amounts will remain. Therefore, the CPRHS, and more specifically the CES, may be contaminated by residual activated dust during the transportation of these components between the VV and the HCB. Activated dust in the CES can have two sources:

- migration from VV to CPRHS during the docking stage, especially close to the maintenance door,
- transfer from VV components or RH tools on which surfaces dust has adhered.

As the CES is not shielded, residual activated dust lead to a residual dose rate around the CES. In case of failure or incident during the transportation, hands-on operations may be needed to repair the CES, the ICPHS or the CTS. If the CES transports activated components, dose rate levels have already been estimated [5]. But if the CES do not transport any activated components but contain some residual activated dust, no dosimetric estimation has been published nowadays to our

* Corresponding author.

E-mail address: Cindy.LELOIREC@cea.fr (C. Le Loirec).

<https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2018.04.027>

Received 9 October 2017; Received in revised form 26 March 2018; Accepted 8 April 2018

Available online 20 May 2018

0920-3796/© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

Table 1
Activated dust nuclides important for safety analysis.

Dust spectrum	Activity (Bq/kg) at plasma stop
W187	8.44E+13
W185	5.08E+12
W181	1.98E+12
Re186	2.82E+11
Re188	9.45E+11
Ta182	3.35E+10
Ta186	1.55E+10
Ta183	7.35E+09
Ta184	8.47E+09
Re184	1.86E+09
Co60	9.61E+08

Table 2
Energy groups recommended for ITER studies and used for gamma spectra determination.

Energy groups	High energy bound (MeV)
1	0.001
2	0.01
3	0.02
4	0.05
5	0.10
6	0.20
7	0.30
8	0.40
9	0.60
10	0.80
11	1.00
12	1.22
13	1.44
14	1.66
15	2.00
16	2.50
17	3.00
18	4.00
19	5.00
20	6.50
21	8.00
22	10.0
23	12.0
24	14.0

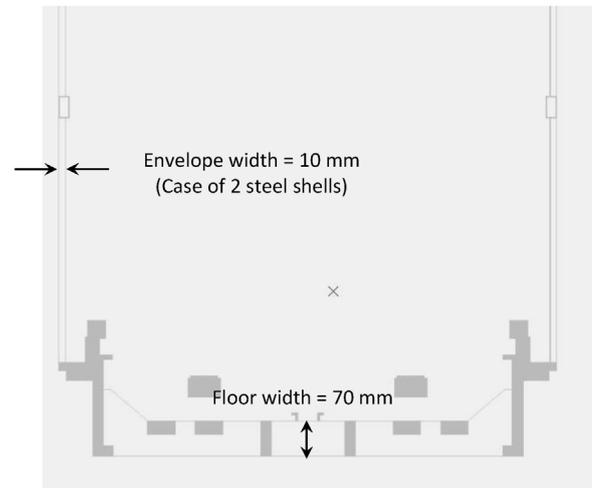


Fig. 2. Final view of the lower part of the CPRHS when two steel shells are taken into account for the envelope.

knowledge.

The objective of this study is to determine the mass of dust allowed in the cask for achieving less than 5 μSv/h for hands-on operations in and close to the cask. Dose rate estimations around and inside the CES were thus performed in the case of 1 g of residual activated dust remained in the CES. It is assumed that the workers will be wearing ventilated protective suits against radioactive contamination when working with tritium. The risk of internal exposure is thus limited [6]. In this evaluation we thus only considered the external dose rate from dust. Dose rates were estimated for several configurations representative of possible dust contamination with 1 g activated dust. Dose rate levels obtained for these configurations constitute a dosimetric data base (DDB) that could be used to estimate the dose rate level due to more complex dust sources obtained by mixing the several configurations defined in this study. This DDB constitutes an helpful tool for ITER Organization in the definition of a decontamination and maintenance plan.

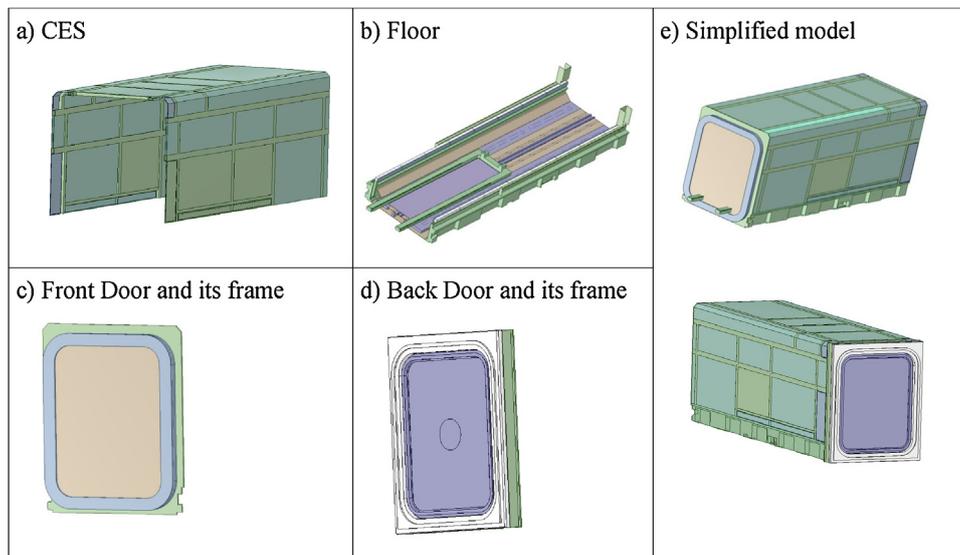


Fig. 1. Main parts of the CPRHS (CES (a), floor (b), front door (c) and back door (d)) remaining after the simplification process and final model of the CPRHS (e).

Table 3
Composition of SS316L used for dose rate estimation.

Element	Weight fraction (%)
C	0.03
Cr	17.5
Ni	12.25
Mo	2.5
Mn	1.8
Si	0.5
P	0.025
S	0.01
N	0.07
Cu	0.3
Ta	0.01
Ti	0.1
B	0.001
Nb	0.01
Co	0.05
Fe	64.844

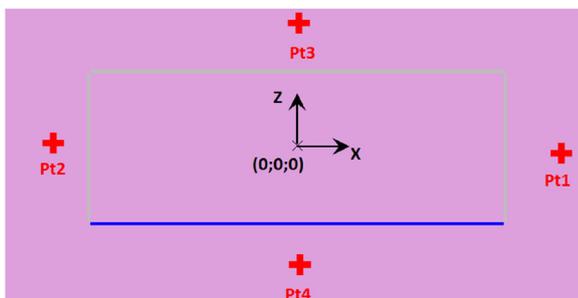


Fig. 3. Localization of the dose rate points around the CES for the (X, Z) plane. Floor steel plate is represented in blue. The walls and the ceiling are represented in grey. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of the article.)

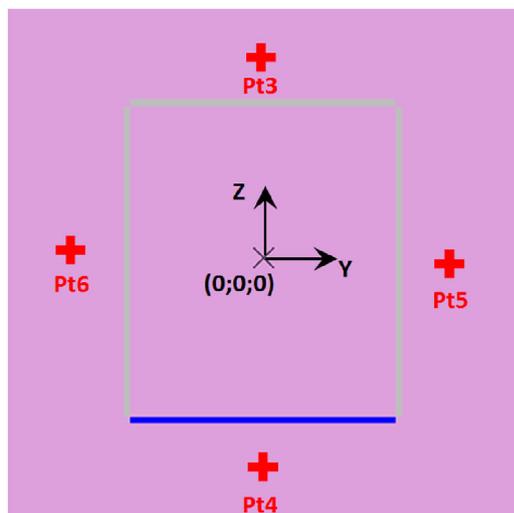


Fig. 4. Localization of the dose rate points around the CES for the (Y, Z) plane. Floor steel plate is represented in blue. The walls and the ceiling are represented in grey. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of the article.)

2. Source modeling

2.1. Dust composition

Dust is formed from the interaction between the plasma, the first wall and the divertor. Dust is thus mainly composed of beryllium and

tungsten coming from the erosion of the first wall and the divertor, respectively. In both cases, dust particles are activated by neutrons during the fusion reaction. Composition of activated dust has already been determined by ITER by carrying out 3D activation calculations. Many radionuclides present in the resulting dust inventory do not contribute significantly to dose rate. According to this, in analyzes that imply a release of activated dust, it is conservatively assumed that dust is 100% activated tungsten. This assumption is the most penalizing of the radiological point of view because tungsten spectra are between 10 to 100 times more penalizing in terms of dose rate and between 2 to 10 times more penalizing in terms of radiological consequences as those of beryllium dust.

The activated dust composition used in this study is the one used by ITER in their safety demonstration ([6] and references herein). It is reported in Table 1. This inventory was obtained by ITER by carrying out 3D activation calculation with the following assumptions [7]:

- dust is mainly composed of tungsten,
- latest updates on the material and design were used,
- 3D MCNP calculations of neutron flux were performed on 8 mm thick divertor target following by a FISPACT activation calculation; surface tungsten removal effect (25 μm thick) was corrected by using 1D calculation,
- SA-2 scenario irradiation history was used.

2.2. Source term determination

Cooling down of dust spectrum was determined with DARWIN-2.3 package [8,9] via the ACTIVATION scheme. PEPIN-2 depletion code was used. The nuclear data library was JEFF-3.1/A. Gamma source was determined for 1 g dust and for 5 cooling times (0 day, 12 days, 1 and 6 months, 1 year) with 24 energy groups as recommended for ITER studies (see Table 2).

2.3. Configurations

A parametric study has been performed to evaluate dose distributions for several configurations representative of dust contamination in the CES. Volumetric sources corresponding to possible dust contamination inside the cask were defined.

Resuspension phenomenon of dust is the first phenomenon of contamination transfer considered here. It occurs when CPRHS handles VV components or RH tools. Three configurations of the source are thus considered to take into account the behavior of the cloud of airborne dust coming from the resuspension phenomenon:

- the source is uniformly distributed on the cask floor (950 cm \times 262 cm \times 0.1 cm): as dust is mainly tungsten (a very dense material), the cloud of airborne dust will mainly fall on the CPRHS floor,
- the source is uniformly distributed on the cask ceiling (950 cm \times 262 cm \times 0.1 cm): the cloud of airborne dust is capable of going on contiguous elements of the component or RH tool and some contamination of the CPRHS ceiling has to be considered,
- the source is uniformly distributed in airborne: dust remain in the form of a cloud.

Direct transfer of activated dust is involved only during direct contact. This situation occurs only once during the docking of the CPRHS to the VV. A fourth configuration was thus studied with the dust source uniformly distributed on the closure door sealing (0.5 cm width and 0.1 cm thickness).

Dose rate level is proportional to the quantity of dust considered in the calculation. We have thus considered for each configuration a source composed of 1 g of dust.

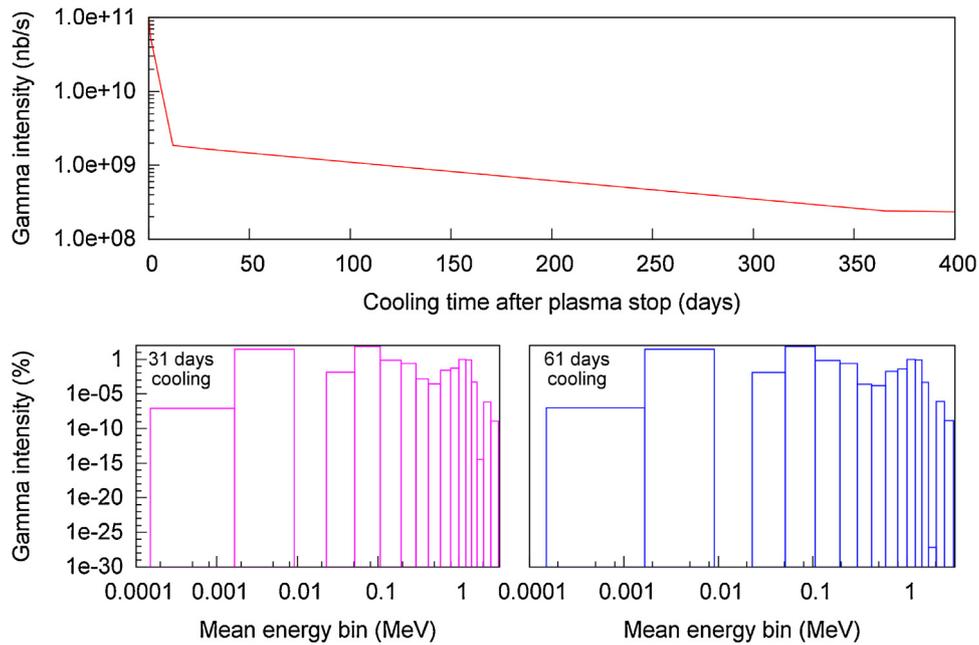


Fig. 5. Intensity of gamma spectrum for the six cooling times (up panel). Spectra obtained for 31 and 61 days cooling are also reported (left and right down panel, respectively).

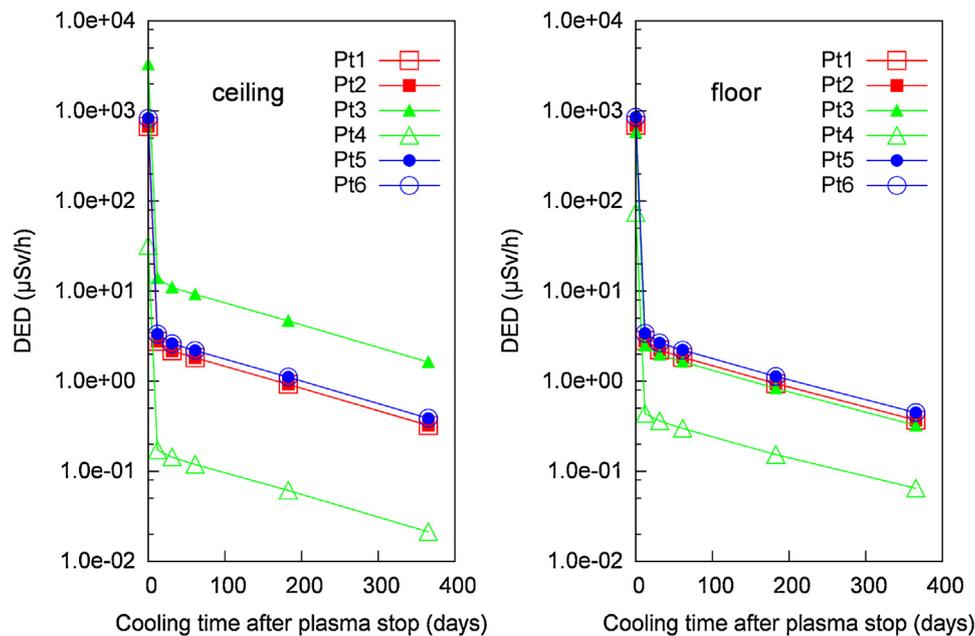


Fig. 6. Evolution of dose rate level at 30 cm from the CES limits with the cooling time for the floor and ceiling dust sources.

3. Geometry and material composition of CES

3.1. CAD based models

The original CAD model of the CPRHS was provided by ITER Organization. The file format is CATIA V5 and it was converted to STEP format in order to be readable both with SpaceClaim Engineer and SuperMC [10,11] softwares. The analysis of the model was performed in two steps:

- CAD model simplification with the CAD computational code SpaceClaim Engineer to set the model consistent with Monte Carlo simulation geometry requirements (quadric surfaces). The simplification has been done following some simple rules

consisting in (i) removing the complex surfaces that Monte Carlo codes cannot understand in their native geometry (splines for instance), (ii) avoiding to fill gaps where neutrons could stream, (iii) removing matter and adding less possible matter when necessary at each step of the simplification. At the end of this step four main parts of the CPRHS remain (Fig. 1): the CES, the floor, the front door and its frame, the back door and its frame. CES is composed of several steel shells and so two simplified configurations were considered to determine the impact of the complex shells modelling on dose rate: SC_CAD_1 model is built from the four main parts with one shell 5 mm width for the CES and SC_CAD_2 model is built from the four main parts with two shells 5 mm width for the CES.

- CAD model translation into TRIPOLI-4® model. Translation is assured by SuperMC code [10,11]. The global volume

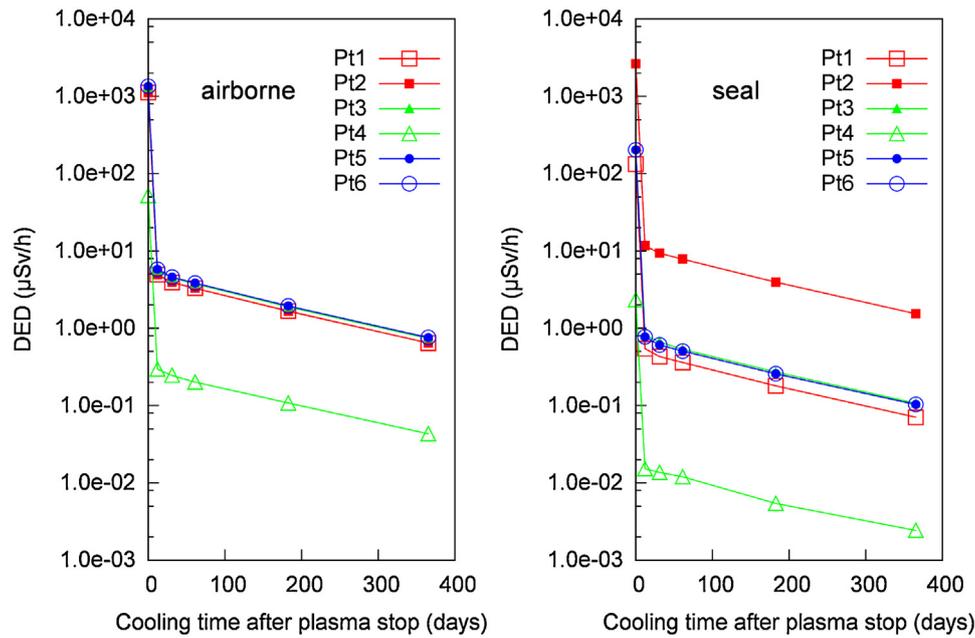


Fig. 7. Evolution of dose rate level at 30 cm from the CES limits with the cooling time for the seal and airborne dust sources.

Table 4

Comparison of dose rate levels obtained for the airborne source with both CAD models and the simplified TRIPOLI-4[®] model of the CES. Results are given in μSv/h. Monte Carlo uncertainties are reported under brackets.

Point	Dose rate (μSv/h)	Simplified CAD models			Simplified T4 model
		SC_CAD_2		SC_CAD_1	SC_T4
2	30 cm (-X)	1.70 (0.26%)	1.66 (0.26%)	3.93 (0.23%)	
1	30 cm (+X)	2.24 (0.22%)	2.19 (0.21%)	3.90 (0.20%)	
5	30 cm (-Y)	3.01 (0.15%)	4.33 (0.12%)	4.58 (0.15%)	
6	30 cm (+Y)	3.00 (0.16%)	4.32 (0.13%)	4.58 (0.15%)	
4	30 cm (-Z)	2.12 (0.21%)	2.06 (0.21%)	0.24 (1.47%)	
3	30 cm (+Z)	3.12 (0.16%)	4.53 (0.12%)	4.48 (0.24%)	
2	100 cm (-X)	1.03 (0.18%)	1.01 (0.18%)	2.38 (0.14%)	
1	100 cm (+X)	1.34 (0.26%)	1.31 (0.15%)	2.37 (0.14%)	
5	100 cm (-Y)	1.99 (0.11%)	2.78 (0.09%)	3.14 (0.13%)	
6	100 cm (+Y)	1.99 (0.11%)	2.77 (0.09%)	3.14 (0.11%)	
4	100 cm (-Z)	1.42 (0.13%)	1.38 (0.13%)	0.20 (0.78%)	
3	100 cm (+Z)	2.06 (0.11%)	2.90 (0.08%)	3.00 (0.13%)	
0	Cask center	23.08 (1.93%)	21.91 (0.35%)	21.67 (0.59%)	

Table 5

Comparison of dose rate levels obtained for the floor source with both CAD models and the simplified TRIPOLI-4[®] model of the CES. Results are given in μSv/h. Monte Carlo uncertainties are reported under brackets.

Point	Dose rate (μSv/h)	Simplified CAD models			Simplified T4 model
		SC_CAD_2		SC_CAD_1	SC_T4
2	30 cm (-X)	0.31 (0.47%)	0.31 (0.48%)	2.21 (0.20%)	
1	30 cm (+X)	0.49 (0.35%)	0.48 (0.36%)	2.23 (0.20%)	
5	30 cm (-Y)	0.36 (0.34%)	0.49 (0.25%)	2.67 (0.14%)	
6	30 cm (+Y)	0.36 (0.35%)	0.48 (0.25%)	2.67 (0.14%)	
4	30 cm (-Z)	14.80 (0.13%)	14.78 (0.13%)	0.36 (1.09%)	
3	30 cm (+Z)	0.70 (0.31%)	0.91 (0.18%)	1.97 (0.23%)	
2	100 cm (-X)	0.23 (0.32%)	0.22 (0.31%)	1.71 (0.15%)	
1	100 cm (+X)	0.33 (0.51%)	0.32 (0.26%)	1.72 (0.16%)	
5	100 cm (-Y)	0.14 (0.38%)	0.18 (0.32%)	2.32 (0.16%)	
6	100 cm (+Y)	0.14 (1.06%)	0.17 (0.32%)	2.31 (0.11%)	
4	100 cm (-Z)	8.24 (0.07%)	8.23 (0.07%)	0.31 (0.52%)	
3	100 cm (+Z)	0.50 (0.19%)	0.64 (0.14%)	1.48 (0.15%)	
0	Cask center	2.93 (0.08%)	2.91 (0.08%)	9.10 (0.06%)	

and mass have been preserved during this conversion to TRIPOLI-4[®] geometry process. A final view of the lower part of the CPRHS is reported in Fig. 2.

3.2. Simplified TRIPOLI-4[®] model

A simplified CES geometry (named SC_T4 configuration in the following) based on the one reported in [5] was used to perform the calculation. The dimensions measured in the simplified CAD based models were used in the SC_T4 configuration. The CES floor was thus represented by a 850 cm × 262 cm × 7 cm steel plate. The envelope and the lateral doors were represented by 5 mm steel thickness which is the thickness envisaged for confinement.

3.3. Comparison of models

For all models, the material is Stainless Steel 316 L which composition is summarized in Table 3. The comparison between both simplified models and SC_T4 configuration was performed for the 31 days

cooling time source. The CES was modeled without any RH tool inside. In a first approximation, we neglected activity release due to RH tools and considered only activity due to dust remained in the CES. As RH tools may induce shielding protection, this assumption can be considered as conservative.

4. Dose rate calculations and analysis

4.1. Dose rate estimation

TRIPOLI-4.10[®] [12] was used with EPDL-97 library to determine the dose rate level for the different configurations. The gamma sources determined with DARWIN at the several cooling times were used as input data. The DOSE_H*(10) predefined TRIPOLI-4[®] score follows ICRP-74 recommendations [13] for dose rate calculations. It was used here to determine the dose rate level at 30 cm and 100 cm from the CES exterior limits. Score points are detailed in Figs. 3 and 4. In addition, dose rate maps were also estimated:

Table 6

Comparison of dose rate levels obtained for the ceiling source with both CAD models and the simplified TRIPOLI-4[®] model of the CES. Results are given in $\mu\text{Sv/h}$. Monte Carlo uncertainties are reported under brackets.

Point	Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)		
	Simplified CAD models		Simplified T4 model
	SC_CAD_2	SC_CAD_1	SC_T4
2 30 cm (-X)	0.90 (0.28%)	0.85 (0.31%)	2.17 (0.12%)
1 30 cm (+X)	1.16 (0.23%)	1.09 (0.23%)	2.18 (0.13%)
5 30 cm (-Y)	1.47 (0.18%)	1.90 (0.14%)	2.61 (0.09%)
6 30 cm (+Y)	1.48 (0.17%)	1.90 (0.14%)	2.62 (0.08%)
4 30 cm (-Z)	1.08 (0.17%)	1.04 (0.17%)	0.14 (1.16%)
3 30 cm (+Z)	7.40 (0.17%)	11.77 (0.15%)	11.01 (0.11%)
2 100 cm (-X)	0.70 (0.18%)	0.66 (0.43%)	1.68 (0.09%)
1 100 cm (+X)	0.87 (0.18%)	0.81 (0.16%)	1.69 (0.10%)
5 100 cm (-Y)	1.50 (0.10%)	2.04 (0.08%)	2.27 (0.07%)
6 100 cm (+Y)	1.50 (0.10%)	2.04 (0.08%)	2.27 (0.06%)
4 100 cm (-Z)	0.68 (0.16%)	0.65 (0.45%)	0.11 (0.62%)
3 100 cm (+Z)	4.71 (0.11%)	6.95 (0.08%)	6.76 (0.06%)
0 Cask center	9.77 (0.04%)	9.14 (0.04%)	8.93 (0.04%)

- inside the CES for 4 mm × 4 mm × 4 mm bins,
- around the CES for 6 mm × 6 mm × 6 mm bins.

4.2. Dose rate levels obtained with the SC_T4 geometry

Calculations were performed at each cooling times with the source intensities reported in Fig. 5. Maintenance is assumed to begin after Tokamak ventilation which is estimated at 4 weeks, thus spectra obtained at 31 and 61 days cooling are also plotted. According to the spectra reported in Fig. 5, the choice of this date induces no consequence on the dose rate estimation, the spectra obtained at 31 and 61 days being very close. We have thus fixed in the following the beginning of the maintenance operations 31 days after the plasma shut-down.

Dose rate levels obtained with the SC_T4 geometry at 30 cm from CES for the four source configurations are reported in Figs. 6 and 7. Dose rate levels decrease exponentially with cooling time as expected. Symmetrical points lead to the same dose rate value (Pt1 and Pt2, Pt5 and Pt6) except Pt4 which leads to a smaller estimation than Pt3 due to the 7 cm width steel plate positioned on the CES floor. 31 days after plasma shut-down, maximal dose rate varies between 2.67 and 11 $\mu\text{Sv/h}$ at 30 cm from the CES exterior limits.

4.3. Validation of the SC_T4 geometry

CES is composed of several steel shells. So two simplified CAD configurations, SC_CAD_1 and SC_CAD_2, were considered here to determine the impact of the complex shells modelling and to check the

conservatism of the SC_T4 configuration. The main differences between the CAD models and the TRIPOLI-4[®] geometry are thus the CES and doors modelling. In the SC_T4 model the door is 5 mm width and in the CAD converted models, the door width is between 15 and 21 mm. Moreover, in the TRIPOLI-4[®] model, the floor is a 7 cm width plate whereas in the CAD models it is a complex assembly of different components.

Results obtained at 30 and 100 cm from the CES limits and with both CAD models were compared with the dose rate estimation obtained with the SC_T4 geometry.

These values are reported in Table 4 for the airborne source. For Pt1 and Pt2, the discrepancies can be explained by the width of the doors. For Pt5, Pt6 and Pt3, results are consistent: SC_T4 model overestimates CAD simplified models. For Pt4, the models differ too much to compare the results. As the point is in the axis of the CES, and as the floor is thinner at this point in the simplified CAD models, gamma are not stopped and dose rate is higher. The results for the point in the center of the CES (Point 0) are very consistent.

The comparison of results reported in Table 5 for the floor source is very difficult. Actually, two phenomena occur: the source location is not the same, and the particle transport is different because of the floor configuration. The highest discrepancy is observed for the Pt4 where the gamma source is less attenuated in the simplified CAD models and for the center point where, on the contrary, more attenuation occurs because of matter between the bottom of the floor and the calculation point.

For the ceiling source (Table 6), except for the Pt4, results are very consistent.

To conclude results obtained with the simplified CAD models and SC_T4 geometry are consistent and TRIPOLI-4[®] modelling leads to conservative dose rate values.

4.4. Dose rate maps

It was estimated by ITER that the maintenance will begin at least one month after the shutdown. Dose rate maps have thus been estimated for a 31 days cooling. They are reported in Figs. 8–12. The seal source is the most critical configuration in terms of dose rate levels, especially if hands-on operations are needed near or in the CES. Actually, the seal source is locally more concentrated for 1 g dust due to the geometry of the seal and leads to the highest dose rate values.

5. Discussion

If CES needs to be maintained or repaired, regulatory requirements and ALARA objectives have to be respected in terms of workers exposure. During such operation, it is assumed that operators will be equipped with ventilated air suit and will be on pseudo-contact with dust. ITER individual exposure limits are set at 100 $\mu\text{Sv/h}$ which is the

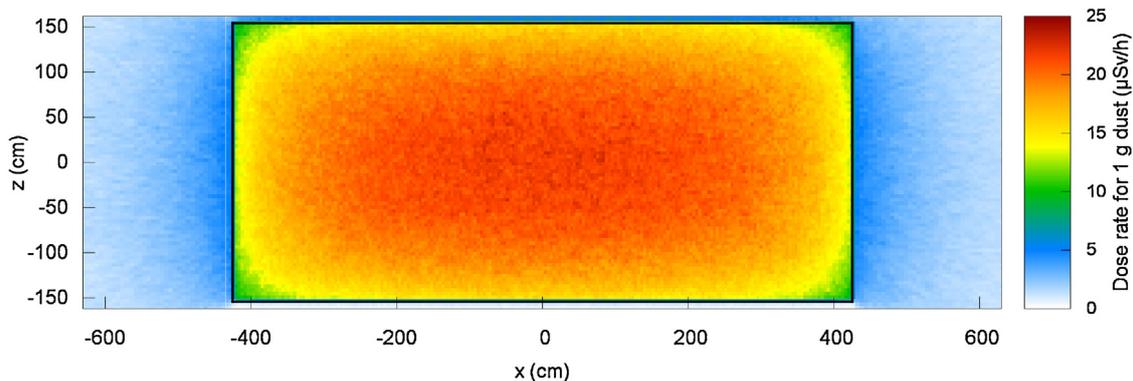


Fig. 8. Dose rate map obtained for the airborne source and with $y = 0$ cm. CES limits are represented in black.

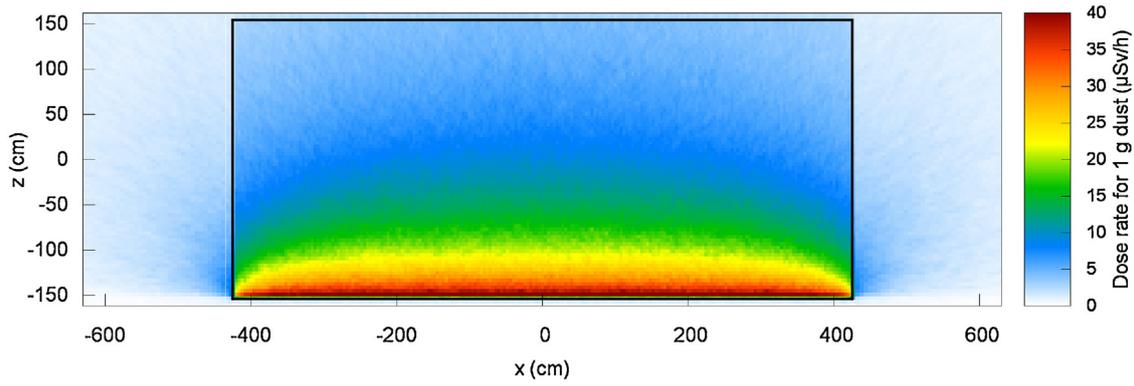


Fig. 9. Dose rate map obtained for the floor source and with $y = 0$ cm. CES limits are represented in black.

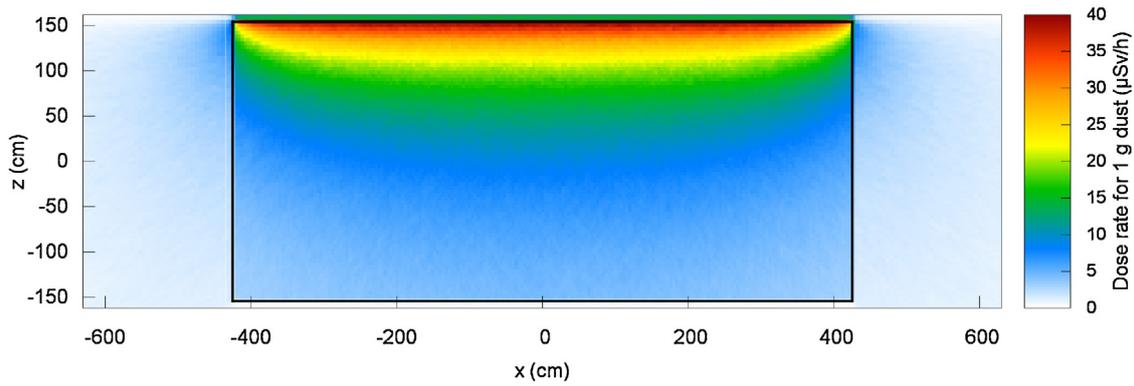


Fig. 10. Dose rate map obtained for the ceiling source and with $y = 0$ cm. CES limits are represented in black.

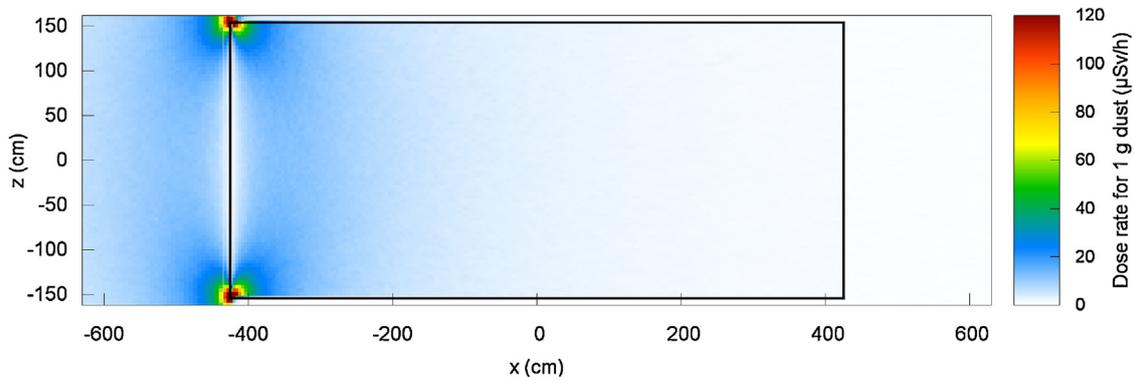


Fig. 11. Dose rate map obtained for the seal source and with $y = 0$ cm. CES limits are represented in black.

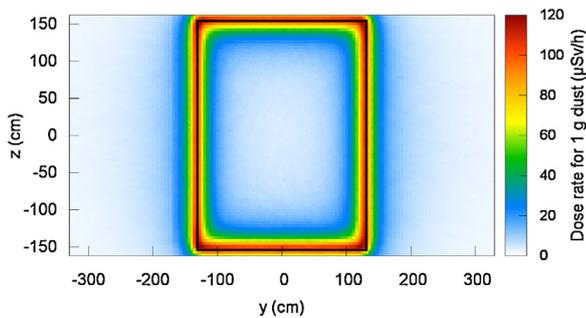


Fig. 12. Dose rate map obtained for the seal source and with $x = -432$ cm (closure door localization). CES limits are represented in black.

upper limit of dose on contact for hands-on maintenance. The acceptable limit to reach will be fixed by the collective doses due to hands-on maintenance and fixed at 0.5 p.Sv/y . Dose optimizations provisions have to be implemented to reduce these doses As Low As Reasonably Achievable (ALARA) [14]. The value considered in this study is thus $5 \text{ } \mu\text{Sv/h}$ [15].

To illustrate the possible use of the dosimetric data obtained in this study, the definition of a decontamination level and maintenance plan, we have considered a complex dust source composed of:

- 1% contamination on the ceiling,
- 84% contamination on the floor,
- 5% contamination in the CES airborne,
- 10% contamination on the closure door sealing.

The dust spectrum obtained for a 31 days cooling is considered here.

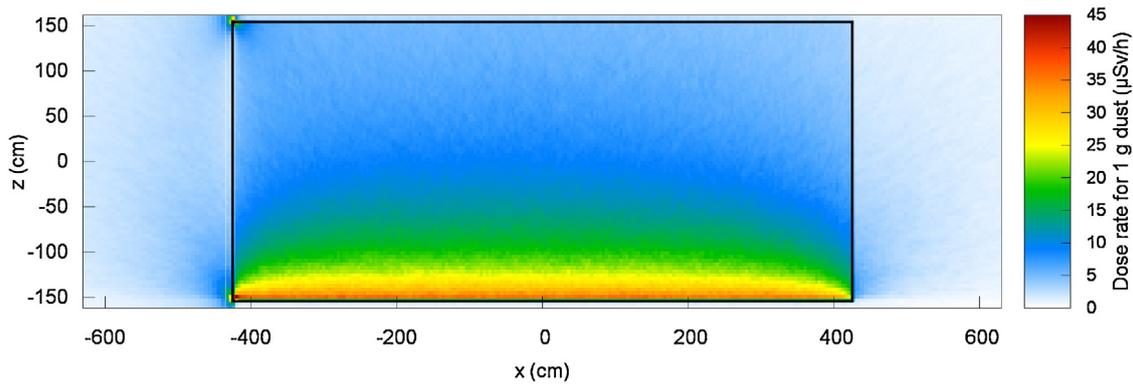


Fig. 13. Dose rate map obtained for the mixed source by the combination of the other maps and for $y = 0$ cm. CES limits are represented in black.

Table 7

Comparison of dose rate levels obtained with a combination of the data base results and with a full Monte Carlo simulation. Results are given in $\mu\text{Sv/h}$. Monte Carlo and propagated uncertainties are reported under brackets.

Point		Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)		Deviation (%)
		DDB mixed	Full Monte Carlo	
1	30 cm (+X)	2.129 (0.45%)	2.127(0.33%)	-0.09
2	30 cm (-X)	3.010 (0.32%)	3.018(0.24%)	0.27
3	30 cm (+Z)	2.055 (0.47%)	2.054(0.33%)	-0.07
4	30 cm (-Z)	0.318 (3.03%)	0.327(1.77%)	2.83
5	30 cm (+Y)	2.556 (0.38%)	2.553(0.21%)	-0.15
6	30 cm (-Y)	2.558 (0.38%)	2.556(0.21%)	-0.04
1	100 cm (+X)	1.612 (0.60%)	1.605(0.22%)	-0.42
2	100 cm (-X)	2.587 (0.37%)	2.592(0.19%)	0.22
3	100 cm (+Z)	1.531 (0.63%)	1.527(0.20%)	-0.25
4	100 cm (-Z)	0.273 (3.52%)	0.276(0.79%)	1.06
5	100 cm (+Y)	2.195 (0.44%)	2.190(0.16%)	-0.23
6	100 cm (-Y)	2.198 (0.44%)	2.188(0.16%)	-0.46

A dose rate map was obtained by summing the single dose maps, according to their respective contributions. Results are reported in Fig. 13. The distribution is close to the one obtained for the floor source, except hot spots (about $68 \mu\text{Sv/h}$) localized at the sealing. Associated Monte Carlo uncertainties were also propagated. Besides, the complex source configuration was inserted in a full Monte Carlo simulation and results were compared with DDB results in Table 7. Deviations between DDB mixed results and Monte Carlo simulations are less than 1% except for Pt4 due to the presence of the steel plate. DDB results can thus be used to determine dose rate levels for complex sources described by a mix of the configurations studied here.

According to the maximal dose rate considered here, $5 \mu\text{Sv/h}$, we have also determined the associated maximal dust mass obtained 31 days after the plasma shut-down for this source configuration. DDB mixed results obtained for points localized at 30 cm for the CES limits were used. According to the dose rate limit considered here ($5 \mu\text{Sv/h}$),

dust mass varies between 1.66 and 2.43 g when Pt4 is neglected. Dust removal techniques with a high efficiency have thus to be chosen in order to allow hands-on operations near or in the cask. A 60-s vacuum cleaning and an additional 60-s brushing and vacuum cleaning of the CES could lead to trace amount of dust about $7.8 \times 10^{-10} \text{ g/mm}^2$ [6]. If the design chosen for the CES and the sealing allow the use of such techniques, dust could be able to be removed to that amount.

6. Conclusion

In this study, dose rate estimations due to remained dust in the CES were carried out inside and outside the CES. The simplified model of the CES has been validated against CAD based models and could be used for further studies. Four uniformized source configurations were considered: ceiling, floor, airborne and closure door seal. TRIPOLI-4.10[®] code and DARWIN 2.3 package were used simultaneously to determine a dosimetric data base of dose rate levels inside and outside CES. It has been shown that dose rate levels stored in the DDB could further be used to determine dose rate maps of complex source configurations based on the four source configurations used in this study. The results obtained for the complex source configuration show that a small amount of dust released into the CES could lead to non-negligible dose rates. Data reported in the DDB provides thus a basis for further developments of the ITER maintenance operations.

Acknowledgments

This work was funding by ITER Organization in the framework of Site Support Agreement 57: Transfer Cask and Decontamination Hot Cell.

The authors would like to express their appreciation to Jean-Pierre Martins for his technical support on CPRHS design.

The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the ITER Organization.

Table 8

Weight breakdown comparison to validate the model after the simplification process.

Component	Reference weight (tons)	Final CAD model (tons)	Deviation (tons)
Cask floor	18	18.6	+0.6
Cask envelope	11.5	5.5	-6.0
Cask rear door	2.5	5.0	+2.5
Double door	5	2.4	-2.6
Tractor system	10	-	-10
Plug rails	5	-	-5.0
Total	52	31.5	-20.5

Table 9

Volume breakdown comparison to validate the model after the translation process.

Component	SpaceClaim (m ³)	TRIPOLI-4 [®] (m ³)	Ratio T4/SC
Cask floor	2.380	2.380	1.000
Cask envelope	0.706	0.710	1.005
Cask rear door	0.642	0.641	0.999
Double door	0.307	0.304	0.990
Total	4.036	4.035	1.000

Appendix A. Simplification of the CAD geometry

The first step in the simplification consisted in sorting the different components in the full model: Transfer Cask support, Transfer Cask rails, Port Plug inside Cask, Transfer Cask, and the Tractors inside Cask. Some parts in the Transfer Cask have been removed in order both to allow the conversion into TRIPOLI-4[®] format data file and to have a simpler model for analysis. The removed parts are: the wheels, the very little elements making the Transfer Cask (like screws, cables, pulleys, bolts), parts of the plug rails and parts of the floor. At the end, the four main parts of the Transfer Cask remain: the Envelope, the Floor, the Front Door and its frame, the Back Door and its frame. Some basic checks have been performed to assure that the simple model was consistent with the initial model. The stainless steel global weight and the breakdown of this weight were compared with the weight of the four components in Table 8.

Reference weights were taken from reference [16]. The removed part of the floor, the wheels and the removed part of the Plug Rails contribute to 5.9 tons to the final CAD model weight. Tractor is still about 10 tons and the expected total weight of the final simplified model is about 31.5 + 5.9 + 10 = 47.4 tons. Compared to 52 tons in the original full model, these conclusions can be drawn: simple model total weight is lower than initial total weight and for neutronics, the model is conservative (less matter induce less shielding if gaps have not been filled); total weight for the simple model and the initial model are consistent.

The second step in the simplification process is the translation of the simplified CAD model to TRIPOLI-4[®]. This phase was performed with SuperMC code [10,11]. The translation was validated by comparing volumes (Table 9).

The global volume and mass have been preserved during this conversion to TRIPOLI-4[®] geometry process. Some discrepancy can be observed on the envelope but 0.5% can be considered as negligible for the current study.

References

- [1] D. Locke, et al., Transfer cask system design activities: status and plan, *Fusion Eng. Des.* 86 (2011) 2101–2104, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2011.03.097>.
- [2] A. Tesini, J. Palmer, The ITER remote maintenance system, *Fusion Eng. Des.* 83 (2008) 810–816, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2008.08.011>.
- [3] D. Locke, et al., Progress in conceptual design of the ITER cask and plug remote handling system, *Fusion Eng. Des.* 89 (2014) 2419–2424, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2013.12.022>.
- [4] J. Martins, et al., Cask and plug handling system design port cell, *Fusion Eng. Des.* 86 (2011) 1886–1889, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2011.03.025>.
- [5] H. Liu, et al., Application of the R2Smesh approach for the accurate estimation of photon radiation dose fields around activated ITER in-vessel components, *Fusion Eng. Des.* 98–99 (2015) 2187–2190, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2015.04.067>.
- [6] M. Saito, et al., Preliminary assessment for dust contamination of ITER in-vessel transporter, *Fusion Eng. Des.* 89 (2014) 2352–2356, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2014.02.023>.
- [7] S. Rosanvallon, et al., Waste management plans for ITER, *Fusion Eng. Des.* 109–111 (2016) 1442–1446, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2015.12.002>.
- [8] A. Tsilanizara, et al., DARWIN: an evolution code system for a large range of applications, *J. Nucl. Sci. Technol.* 37 (2000) 845–849, <http://dx.doi.org/10.1080/00223131.2000.10875009>.
- [9] L. San Felice, et al., Experimental validation of the DARWIN 2.3 package for fuel cycle applications, *Nucl. Technol.* 184 (2013) 217–232, <http://dx.doi.org/10.13182/NT12-121>.
- [10] Y. Wu, et al., CAD based Monte Carlo program for integrated simulation of nuclear system SuperMC, *Ann. Nucl. Energy* 82 (2015) 161–168, <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.058>.
- [11] Y. Wu, F. team, CAD based interface programs for fusion neutron transport simulation, *Fusion Eng. Des.* 84 (2009) 1987–1992, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2008.12.041>.
- [12] E. Brun, et al., TRIPOLI-4 R CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code, *Ann. Nucl. Energy* 82 (2015) 151–160, <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2014.07.053>.
- [13] International Commission on Radiological Protection, *Conversion Coefficients for Use in Radiological Protection Against External Radiation*, ICRP Publication 74, 2016.
- [14] P. Cortes, et al., Optimization of the design phase of the potential impact of ITER on workers, the public and the environment, *Fusion Eng. Des.* 85 (2010) 2263–2267, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.09.004>.
- [15] M. Saito, et al., Decontamination assessment for ITER blanket remote handling system, *Proceedings of PLASMA2014 (Nigata, Japan, Nov. 2014) 20PB-10 (2014)*.
- [16] C. Andrada, 23.03-B.01 Report, ITER D PR837S v1.0.

PARTIE III

PRÉDICTION ET SUIVI DE DOSE DANS LE DOMAINE MÉDICAL ET NUCLÉAIRE

Le but de la radioprotection est d'empêcher ou de réduire les risques induits par les rayonnements ionisants, soit :

- éviter l'apparition d'effets déterministes,
- limiter la probabilité d'apparition de cancers radio-induits par l'exposition aux faibles doses (principe ALARA ¹).

Pour atteindre ces objectifs, les trois grands principes de la radioprotection doivent être mis en oeuvre pour toute activité faisant intervenir des rayonnements ionisants :

- **Le principe de justification**

Une activité nucléaire ne peut être entreprise que si elle est justifiée par les avantages qu'elle procure (en matière sanitaire, sociale, économique, scientifique) rapportés aux risques inhérents à l'exposition aux rayonnements ionisants auxquels elle est susceptible de soumettre les personnes (risques d'accident radiologique, exposition des travailleurs, rejet d'effluents, production de déchets radioactifs).

- **Le principe d'optimisation**

L'exposition des personnes aux rayonnements ionisants résultant des activités nucléaires doit être maintenue à un niveau aussi faible qu'il est raisonnablement possible compte tenu des techniques, des facteurs économiques et sociaux et le cas échéant de l'objectif médical recherché.

- **Le principe de limitation**

L'exposition d'une personne aux rayonnements ionisants résultant d'une activité nucléaire doit respecter les limites de dose fixées par voie réglementaire, sauf lorsque cette personne fait l'objet d'une exposition à des fins médicales (traitement ou diagnostique).

Ces trois principes de base sont déclinés différemment en fonction de la population exposée : le public, les patients et les travailleurs.

Il y a de nombreux aspects de la radioprotection en médecine qui diffèrent des autres domaines impliquant la manipulation de rayonnements ionisants. Dans [122], l'auteur présente et justifie certaines de ces différences et souligne les raisons et les avantages de ces différences. Il pense (et je suis d'accord avec lui) qu'il est important de comprendre ces différences car nous sommes tous susceptibles d'être des patients à un moment de notre vie et d'être exposés à des rayonnements ionisants pour des procédures d'imagerie à plusieurs reprises voire, dans certains cas, pour des indications thérapeutiques. L'auteur développe ces nombreux aspects mais je ne me focalise ici que sur certains d'entre eux :

- Les principes de radioprotection sont déclinés de façon spécifiques pour les patients :
 - toute exposition médicale aux rayonnements ionisants se doit d'être justifiée par une raison médicale ; si une autre modalité ne délivrant pas de rayonnement ionisant est disponible et permet l'obtention d'un diagnostic similaire, cette autre modalité sera choisie ;
 - le principe de limitation de la dose n'existe pas en tant que tel car de telles limites ou contraintes feraient souvent plus de mal que de bien ; les doses associées sont donc proportionnelles à l'usage médical : suffisamment élevées dans le VC en radiothérapie pour "tuer" la tumeur mais suffisamment faible au niveau des OAR pour les protéger ; optimisée en imagerie pour obtenir une image permettant un diagnostic fiable ;

1. As Low As Reasonably Achievable

- comme nous l'avons vu ci-dessus, le principe d'optimisation est intimement lié au principe de limitation en médecine.
- Les observables utilisées pour estimer la dose sont différents :
 - En médecine la dose absorbée aux organes et/ou aux tissus(en Gray) du patient est l'observable de référence.
 - L'estimation de la dose reçue par un opérateur de l'industrie nucléaire, un personnel soignant, ou tout autre travailleur manipulant des rayonnements ionisants est réalisée avec le débit d'équivalent de dose. L'équivalent de dose ambiant ($H^*(10)$ exprimé en Sievert) est une quantité opérationnelle pour la surveillance de zone. Il est défini sur la base d'une valeur d'équivalent de dose en un point d'un simple fantôme, la sphère ICRU , qui est une sphère de matériau équivalent tissu. Cette observable est utilisée car elle est mesurable et représente une évaluation surestimée de la dose efficace et de la dose cutanée.
- La précision attendue sur les données dosimétriques en médecine doit être fine au niveau dosimétrique (de l'ordre de 3%) et spatial (de l'ordre de 3 mm). Au niveau opérationnel, la précision sur le débit d'équivalent de dose est moins exigeante : de l'ordre de 5 à 10%.
- Les géométries mises en oeuvre sont également différentes. Dans le domaine médical, en fonction du but recherché, l'échelle pourra varier de la taille de la cellule à la taille d'un gros organe soit de quelques μm à quelques cm. Dans le domaine opérationnel, on se trouve à l'échelle d'une installation et d'un local (soit le mètre voire plus). Cependant, il est parfois nécessaire de prendre en compte de petites structures, en particulier les petites ouvertures dans les protections biologiques responsables du streaming des particules et du débit de dose en-dehors de la protection biologique.

Dans ce chapitre, j'illustre ces différences entre les applications médicales et nucléaires dans le cadre spécifique de l'estimation et du suivi de la dose par trois études auxquelles j'ai participé. Les observables et échelles mis en oeuvre sont résumés dans le tableau 6.1. Un prologue à ces travaux est présenté dans la suite de cette introduction.

TABLE 6.1 – Observables et échelles spatiales mises en oeuvre dans le cadre des études présentées dans ce chapitre.

Titre abrégé	Observable et unité	Echelle spatiale
Estimation des S-values en médecine nucléaire	Dose (Gy)	Echelle de la cellule
Estimation de la dose en TDM	Dose (Gy)	Echelle de l'organe
Estimation des débits d'équivalent de dose pour les activités de A&D	DED (Sv/h)	Echelle de l'installation

Détermination de données dosimétriques pour la médecine nucléaire Depuis mon doctorat, je me suis beaucoup intéressée à la dose délivrée au patient lors d'actes de médecine nucléaire à visée diagnostique mais également thérapeutique. Le traitement à l'aide de radiopharmaceutiques est historiquement associé au traitement des cancers de la thyroïde par ^{131}I mais il a connu une croissance rapide au cours de la dernière décennie pour le traitement de nombreux autres types de cancer. En 1905, le professeur Ennion G. Williams indiquait déjà dans son article intitulé "The Regulation and Measurement of the Therapeutic Dose of the Roentgen Ray" que la radiothérapie « ne doit plus être considérée comme un agent thérapeutique empirique ou une lumière magique qui

agit en vertu de sa présence auguste et mystérieuse » [123]. Or, plus d'un siècle plus tard, force est de constater que la radiothérapie moléculaire est couramment administrée de façon empirique et sans directives dosimétriques personnalisées. Pourtant, la planification de la dose en radiothérapie "classique" a largement profité aux patients en réduisant l'incidence des effets secondaires et en améliorant la survie globale des populations traitées selon cette modalité. Bien que la thérapie basée sur la dosimétrie avec des agents théranostiques ne soit pas actuellement la norme de soin, d'ici dix ans, il sera largement considéré comme dépassé de traiter les patients avec des niveaux fixes d'activité administrée. De nombreuses équipes travaillent donc actuellement au développement et à la normalisation de méthodologies et d'outils sûrs et efficaces de la planification du traitement en radiothérapie moléculaire.

La dosimétrie interne des radionucléides est fondée sur le cadre élaboré par le comité sur la dose de rayonnement interne (MIRD²). Ce comité vise à fournir des méthodes normalisées et des modèles mathématiques pour évaluer les doses de rayonnement interne provenant de produits radiopharmaceutiques administrés au cours d'un examen. Dans la communauté de la médecine nucléaire, l'objectif est d'effectuer des calculs pour obtenir des estimations de dose pour divers organes du corps une fois que la cinétique d'un agent radiopharmaceutique est établie. Une dosimétrie précise pour chaque examen est nécessaire pour optimiser les protocoles de médecine nucléaire et estimer l'exposition aux rayonnements ionisants ainsi que les risques associés. Dans la méthode du MIRD, les doses absorbées dans les organes cibles sont estimés en fonction des activités accumulées dans une source. Les codes de dosimétrie interne aident à normaliser les calculs de dose en utilisant des modèles, des fantômes et des techniques de dosimétrie standardisés. Les fractions absorbées et fractions absorbées spécifiques qui représentent le dépôt d'énergie de rayonnement dans les organes et les tissus cibles est essentiel pour déterminer la dose d'incorporation de radionucléides lors d'une procédure de médecine nucléaire. Pour obtenir les fractions absorbées et les autres coefficients de conversion, des fantômes de calcul et les méthodes Monte Carlo sont souvent utilisés.

Étant donné que les valeurs S sont basées sur des fantômes, elles supposent une anatomie saine ; par conséquent, la dosimétrie des tumeurs ne peut pas être traitée directement dans le formalisme MIRD, car il serait impossible de générer des valeurs S pour tous les emplacements de tumeurs possibles, tailles et formes dans le fantôme anthropomorphe numérique. Par conséquent, lors de l'utilisation de la méthode MIRD pour la dosimétrie radiopharmaceutique, il est fréquent d'effectuer un calcul secondaire spécifique à la tumeur. Le plus souvent, cela est effectué par interpolation d'estimations de fraction d'énergie absorbée à partir de modèles de tumeurs sphériques. Il s'agit implicitement de la spécification d'une taille de sphère équivalente représentative de la tumeur d'un patient. Ces approximations sphériques ont été trouvées pour reproduire avec précision la dose moyenne dans la tumeur sous-jacente, avec un léger biais vers la sous-estimation. Le code EPOTRAN de structure de trace des électrons et positons dans l'eau, initialement développé pour évaluer la contribution réelle du parcours des positons dans la résolution de l'imagerie TEP lors de mon doctorat, se révèle également un outil précis pour le calcul de la dose à l'échelle nanométrique. Son utilisation pour estimer les fractions absorbées de plusieurs isotopes de l'iode dans une géométrie sphérique représentative d'une tumeur est illustrée dans le premier chapitre de cette partie.

Estimation de la dose reçue par le patient lors d'actes d'imagerie Mon intérêt pour

l'estimation des niveaux de dose délivrés lors d'actes d'imagerie s'est poursuivi au CEA LIST *via* l'encadrement du travail de thèse de Camille Adrien.

Les doses délivrées par l'imagerie sont entre 1000 et 10 000 fois inférieures aux doses nécessaires pour traiter les tumeurs. Néanmoins des expositions répétées dans le cadre de suivi d'évaluation de traitement, en particulier de jeunes enfants, accentuerait le développement de certaines pathologies telles que les leucémies. En effet, malgré sa large utilisation en diagnostic, les performances du TDM restent à ce jour mal appréhendées. La communauté médicale est confrontée à un manque d'indicateurs robustes et représentatifs de la dose aux organes et les métriques physiques couramment utilisées dans les centres cliniques sont aujourd'hui inadaptées pour évaluer la qualité diagnostique des images médicales. Les récents développements que sont l'implémentation de nouveaux algorithmes de reconstruction et de traitement d'image et l'utilisation de l'imagerie spectrale rendent encore plus complexe l'évaluation des caractéristiques physico-chimiques du TDM.

Dans le cadre de la thèse de Camille Adrien, un outil de calcul de dose basé sur le code PENLOPE a été développé afin non seulement d'estimer la dose délivrée par le TDM lors d'actes radiologiques mais également d'optimiser les protocoles d'imagerie en déterminant les paramètres de la machine suivant les principes ALARA pour la dose et AHARA³ pour la qualité de l'image diagnostique. Le développement et la validation de la partie dosimétrique de cet outil sont détaillés dans le second chapitre de cette partie.

Estimation de l'ambiance dosimétrique d'installations en cours de démantèlement

Suite à ma mutation sur le CEA de Cadarache, j'ai trouvé intéressant de transférer certaines méthodologies rencontrées dans le domaine médical vers le domaine nucléaire, avec en particulier la mise en oeuvre et l'étude de l'estimateur *e*-TLE rencontré lors de mon post-doctorat à l'INSA de Lyon, dans le code Monte Carlo du CEA, TRIPOLI-4®.

La simulation informatique 3D et la technologie de réalité virtuelle permettent de visualiser la dose rencontrée par les travailleurs lors des opérations de démantèlement à l'aide d'outils de calcul de dose en temps réel simplifiés. Ces outils utilisent généralement une approche macroscopique pour le calcul du débit de dose gamma, à savoir la méthode d'intégration du noyau ponctuel avec des facteurs d'accumulation. Ce modèle physique simplifié améliore les performances de calcul, mais présente également certaines restrictions. En revanche, les méthodes stochastiques Monte Carlo permettent une estimation précise du débit de dose gamma, mais le temps de calcul est prohibitif pour les estimations de dose en temps réel. Pour accélérer la simulation, les codes MC peuvent être utilisés en combinaison avec des techniques de réduction de la variance (VRT), qui fonctionnent généralement bien pour les problèmes de pénétration profonde, mais pas pour les problèmes dominés par la diffusion. Il est donc nécessaire de développer un nouveau type d'algorithme capable d'aborder des configurations caractérisées simultanément par l'atténuation et la réflexion du rayonnement dans les géométries avec un pourcentage élevé de matériaux de faible densité (c.-à-d. l'air) où l'absence de collisions peut limiter l'efficacité de la VRT actuelle.

Dans le cadre de la thèse d'Ettore Guadagni, que j'encadre, une nouvelle méthodologie hybride a été implémentée dans le code TRIPOLI-4®. L'algorithme est basé sur l'estimateur de longueur de trace exponentielle fractionné (*se*-TLE pour split-exponential track-length estimator) [24]. L'implé-

3. As High As Reasonably Achievable

mentation, la validation et l'analyse des performances de ce nouvel estimateur sont décrites dans le dernier chapitre de cette partie.

Chapitre 7

Détermination de données dosimétriques pour la médecine nucléaire

Le code EPOTRAN¹ est un code Monte Carlo modélisant le suivi pas à pas des positons dans l'eau liquide et gazeuse pour des énergies variant du seuil d'excitation de l'eau (7.4 eV) à 1 MeV. Tous les processus induits par les positons et les électrons sont pris en compte *via* les sections efficaces totales et différentielles d'interaction. Ces dernières sont calculées dans le cadre de la mécanique quantique en utilisant la méthode des ondes partielles.

- Diffusion élastique

Bien que la molécule d'eau soit tri-atomique, la distribution de charge est quasi sphérique et gouverné principalement par l'atome d'oxygène « central », ce qui nous permet d'estimer le potentiel de perturbation de la molécule d'eau par un potentiel à symétrie sphérique $V(r)$ composé de trois termes différents tenant compte de la polarisation statique et, pour les électrons, des contributions d'échange.

- Ionisation

L'ionisation est ici traitée à l'aide de sections efficaces totales et différentielles théoriques calculées avec le modèle de Born des ondes distordues sans échange dans lequel les particules incidentes et diffusées sont décrites par une fonction d'onde plane alors que l'électron éjecté est décrit par une onde distordue.

- Excitation

L'excitation inclut tous les processus qui modifient l'état interne de la molécule, sans émission d'électrons. Ces processus comprennent, en particulier, les transitions électroniques vers des états de Rydberg ou des états dégénérés, les attachements dissociatifs conduisant à la formation d'ions négatifs, l'excitation dissociative conduisant aux radicaux excités (H , O et OH) et dans une moindre mesure les excitations vibrationnelles et rotationnelles.

- Formation de positronium²

Dans la majeure partie des codes de structure de trace existants, le processus d'annihilation

1. Electron and POSitron TRANsport

2. Le positronium correspond à l'état lié de l'électron et du positon. Il est l'un des systèmes bipolaires leptoniques les plus fondamentaux.

est considéré comme une collision " en vol " entre un positon incident et un électron cible supposé libre et au repos. Cependant, ce genre de description ignore complètement l'autre voie d'annihilation du positon au cours duquel un positronium peut être formé. En fait, ces deux processus d'annihilation sont concurrentiels et présentent une probabilité d'occurrence dépendant de l'énergie du positon incident. Ainsi, la fraction de positons incidents annihilant sans formation de Positronium est une fonction décroissante atteignant, à des énergies de positons élevées, une valeur asymptotique de 17 % alors que la fraction de positons incidents s'annihilant par la formation de positronium augmente avec l'énergie du positon pour atteindre une valeur asymptotique de 83 %.

Les études de trajectoire de positons obtenues *via* cette approche se sont avérées utiles pour évaluer la contribution du parcours des positons dans la résolution de l'imagerie TEP. Ce code représente également un outil précis pour le calcul de la dose à l'échelle nanométrique en fournissant une distribution spatiale détaillée des dépôts d'énergie. Ce point a été analysé finement dans l'article reporté dans ce chapitre pour le cas spécifique de la radiothérapie de la thyroïde par iode en comparant les valeurs de fractions absorbées obtenues avec différents codes.



Contents lists available at ScienceDirect

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B

journal homepage: www.elsevier.com/locate/nimb

Comparison of Geant4-DNA simulation of *S*-values with other Monte Carlo codes



T. André^{a,b,1}, F. Morini^c, M. Karamitros^{a,b,d,1}, R. Delorme^{e,f}, C. Le Loirec^f, L. Campos^g, C. Champion^{a,b,1}, J.-E. Groetz^h, M. Fromm^h, M.-C. Bordage^{i,1}, Y. Perrot^{j,1}, Ph. Barberet^{a,b,1}, M.A. Bernal^{k,1}, J.M.C. Brown^{l,1}, M.S. Deleuze^c, Z. Francis^{m,n,1}, V. Ivanchenko^{o,p,1}, B. Mascialino^{q,1}, C. Zacharatou^{r,1}, M. Bardiès^{s,1}, S. Incerti^{a,b,*}

^a Université Bordeaux 1, CENBG, UMR 5797, F-33170 Gradignan, France

^b CNRS, IN2P3, CENBG, UMR 5797, F-33170 Gradignan, France

^c Research Group of Theoretical Chemistry and Molecular Modelling, Hasselt University, Agoralaan Gebouw D, B-3590 Diepenbeek, Belgium

^d CNRS, IN2P3, UMR 5287, F-33400 Talence, France

^e LPSC, Université Joseph Fourier Grenoble 1, CNRS/IN2P3, Grenoble INP, 38026 Grenoble, France

^f CEA, LIST, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

^g Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, Brazil

^h Université de Franche-Comté, Laboratoire Chrono-Environnement, UMR CNRS 6249, Besançon, France

ⁱ Laboratoire Plasmas et Conversion d'Énergie, UMR 5213 CNRS-INPT-UPS, Université Paul Sabatier, Toulouse, France

^j Laboratoire de Physique Corpusculaire, UMR 6533, Aubières, France

^k Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, SP, Brazil

^l School of Physics, Monash University, Melbourne, Australia

^m Université Saint Joseph, Science Faculty, Department of Physics, Beirut, Lebanon

ⁿ The Open University, Faculty of Science, Department of Physical Sciences, Walton Hall, MK7 6AA Milton Keynes, United Kingdom

^o Ecoanalytica, 119899 Moscow, Russia

^p Geant4 Associates International Ltd., United Kingdom

^q Thermo Fisher Scientific, Rapskatan 7, 75137 Uppsala, Sweden

^r Institut Bergonié, Bordeaux, France

^s CRCT, UMR 1037 INSERM, Université Paul Sabatier, Toulouse, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 16 July 2013

Received in revised form 31 October 2013

Keywords:

Geant4-DNA
Monte Carlo
Liquid water
S-values

ABSTRACT

Monte Carlo simulations of *S*-values have been carried out with the Geant4-DNA extension of the Geant4 toolkit. The *S*-values have been simulated for monoenergetic electrons with energies ranging from 0.1 keV up to 20 keV, in liquid water spheres (for four radii, chosen between 10 nm and 1 μm), and for electrons emitted by five isotopes of iodine (131, 132, 133, 134 and 135), in liquid water spheres of varying radius (from 15 μm up to 250 μm). The results have been compared to those obtained from other Monte Carlo codes and from other published data. The use of the Kolmogorov–Smirnov test has allowed confirming the statistical compatibility of all simulation results.

© 2013 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Radiation therapy is a cancer treatment technique that consists in irradiating tumor tissues in order to kill malignant cells by mainly damaging nuclear desoxyribonucleic acid (DNA) and sparing as much as possible surrounding healthy tissues. Two types of treatments can be then distinguished, namely, external

and internal radiation therapy. While the former consists in irradiating patients with external beams of photons, electrons, protons or ions, the latter implies the use of a radioactive source in the close vicinity of tumor cells. In this context, two techniques should be distinguished: brachytherapy and targeted internal radiation therapy. In brachytherapy [1], radiation sources (usually enclosed within non-radioactive capsules) are implanted close to the tumor in the form of seeds, wires, needles, or plaques. Targeted internal radiation therapy [2,3] is helpful in the case of tumors that are small and disseminated in the organism. It is based on the particular affinity between the radioactive substance and the tumor cells, mostly by means of a vector. The radioactive

* Corresponding author at: Université Bordeaux 1, CNRS/IN2P3, Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux Gradignan, CENBG, Chemin du Solarium, BP120, 33175 Gradignan, France. Tel.: +33 5 57 12 08 89; fax: +33 5 57 12 08 01.

E-mail address: incerti@cenbg.in2p3.fr (S. Incerti).

¹ The Geant4-DNA collaboration.

agent is fixed on this vector, which preferentially attaches to the tumor cells. The radioactive substance can be injected intravenously. The choice of the radioisotope is essential [4] and must be adapted to the pathology. For example, Auger-emitting radionuclides have a strong potential for therapy [5] since they can deliver low energy electrons with very short ranges, close to the cancer metastases, preserving at maximum surrounding tissues. This treatment modality is original since it combines a systemic approach (like chemotherapy) with a mode of action based on tissue irradiation (like radiation therapy). Whether they are α particles, β particles, Auger electrons or electrons from internal conversion, several criteria for selecting the radioisotope and the vector have to be considered [2,4]:

- the emitted particles energies, which determine their range, i.e. the average distance they travel through biological matter,
- the half-life period of the isotope,
- the fixation of the isotope on the vector, which needs to be efficient and stable, in order to avoid any break and prevent irradiation of healthy surrounding tissues,
- the conditions of use in a routine treatment: the isotope must be abundant in nature, and its production can't be too costly.

The selective character of vectorized internal radiation therapy for specific cancer cells can be obtained through various vectors. In the simplest case, the radioisotope is injected and acts directly on the cells [2] because of the affinity between the obtained radioisotope-vector molecule and a particular cell line. This is the case with ^{131}I for differentiated thyroid cancer. Monoclonal antibodies are an important class of vectors. They are immune system proteins that are specific to an antigen associated with a particular type of cancer. A particular technique involving monoclonal antibodies is the pre-targeting, or Affinity Enhancement System [4]. This method implies two successive injections, namely, a first one for the antibodies and a second one for the radioactive agent. The advantages are an efficient and long-term fixation on tumors, with a noticeable decrease of irradiation to healthy tissues. Besides, peptide radiolabelling [2,6–8] is another alternative. These molecules, also called radio-ligands, are specific to a given receptor, overexpressed in case of cancer pathology.

Internal dosimetry of radionuclides is based on the framework developed by the committee on Medical Internal Radiation Dose (MIRD) [9–11]. This committee aims at providing standard methods and mathematical models for assessing internal radiation doses from administered radiopharmaceuticals. The MIRD approach simplifies the problem of assessing dose for many radionuclides in the human organs, tissues, and fluid compartments. In internal radiotherapy, the dose absorbed by a specific region of the body is expressed as:

$$\bar{D}(r_T \leftarrow r_S) = \bar{A}_{r_S} S(r_T \leftarrow r_S),$$

where r_S is the source region, r_T the target region, $\bar{D}(r_T \leftarrow r_S)$ the average dose absorbed by the target region, \bar{A}_{r_S} the cumulated activity of the source region, and $S(r_T \leftarrow r_S)$ the S -value, on which we focus the current study. These are useful quantities related to the deposited energy at the level of the organ or the cell.

This quantity can be calculated notably by Monte Carlo techniques, which are used in a large variety of application domains. These methods, based on probability function sampling by use of random (or pseudo-random) numbers, enable to solve various problems, particularly those where stochastic processes are involved. Compared to the analytical ones, Monte Carlo methods provide more accurate physical models, finer geometrical descriptions (e.g. allowing inhomogeneities to be taken into account). In case of radiation therapy and more generally for the description of particle-matter interactions, it is thus possible to carry out

detailed simulation of particle transport. The general scheme adopted for a simulation of a physical interaction follows a few steps in order to determine:

- the distance to the next physical interaction (according to the particle type and the medium),
- the material that interacts with the particle (according to the composition of the medium),
- the physical interaction type,
- the kinematics of the interaction, including the energy lost by the incident particle (locally deposited and/or transferred to the secondary particles potentially generated), the scattering and ejection directions.

These quantities are deduced from total and differential cross sections, the latter being calculated for each type of interaction by means of theoretical and/or semi-empirical models [12–15], or by use of interpolation procedures from pre-calculated data tables. This sequence is repeated for each particle (primary as well as secondary) until it is locally absorbed, i.e. its energy becomes lower than a selected energy threshold, or exits from the region of interest.

Another solution adopted by some codes is to fix a “production threshold”, in terms of energy or distance: the secondary particles are not explicitly simulated if their energy is not high enough to travel this distance in a given material.

The current work aims to compare the accuracy of the “Geant4-DNA” very low energy extension of the general-purpose Geant4 Monte Carlo simulation toolkit to a large set of Monte Carlo codes for the calculation of S -values. In a first stage, the accuracy of the codes will be compared for incident monoenergetic electron sources in nanometer size spherical geometries. Then, in a second stage, five isotopes of iodine will be simulated, as previously done in [16]. Furthermore, a simplified geometrical model of the colloid and the follicular cells of the thyroid will be used in both cases.

2. Materials and methods

2.1. Monte Carlo codes

Several Monte Carlo codes are currently available in the literature for simulating the radio induced interactions in biological matter. Among them, let us mention the Geant4-DNA extension of the Geant4 toolkit, CPA100, EGSnrc, EPOTRAN (with its extension CELLDOSE), MCNP and PENELOPE. The accuracy of these codes has been compared in this work.

- The recent Geant4-DNA very low energy extension [15,17,18] is included in the general-purpose Geant4 simulation toolkit [19,20], a set of libraries written in C++, which enables to simulate particle transport and interactions in matter in a large variety of applications fields in high energy physics, space science and medical physics. Geant4-DNA allows the simulation of the step-by-step transport of particles in liquid water, including interactions of electrons, protons, hydrogen atoms and helium ions as well as a few ions (C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} and Fe^{26+}). The covered energy ranges vary between 7.4 eV and 1 MeV for electrons, between 100 eV and 100 MeV for protons and hydrogen, and between 1 keV and 400 MeV for helium and its charged states. Geant4-DNA is mainly focused on the simulation of biological damages at the DNA scale;
- CPA100 [21] is a specific-purpose code, which simulates step-by-step the transport of electrons and photons in liquid water, for energies between 10 eV and 200 keV. The simulation of physico-chemical and chemical stages (water radiolysis and damage of DNA) is also possible;

- EGSnrc [22] is another general-purpose code, enabling the simulation of electron and photon transport from a few keV up to 100 GeV; it is today considered as the “gold standard” for medical physics simulations;
- EPOTRAN [23] and more specifically CELLDOSE [16] is a specific-purpose simulation code for the step-by-step modelling of electron and positron transport, in liquid water and in gaseous state. The energy of the primary particles can vary between 7.4 eV and 1 MeV;
- MCNP [24] is a general-purpose code for the transport of electrons, photons and neutrons. In the case of electrons, a condensed algorithm is used. Electrons can be transported from 1 keV to 1 GeV.
- PENELOPE [25] is a general-purpose code enabling the simulation of electron, positron and photon transport. The available cross sections cover a large set of elements ($Z = 1-99$) and materials, for an energy range from 50 eV up to 1 GeV;

A summary of energy ranges for the simulation of electron transport covered by these codes is presented in Table 1. All these codes are used in the context of medical physics, thus it is interesting to investigate their respective accuracy, in particular for targeted radiotherapy. Calculations of S -values (for ^{131}I beta spectrum, in water spheres with radii between 150 μm and 6 mm) have been already described in the literature, e.g. with Geant4 [26], ETRAN [27] and PARTRAC [28], where it was shown that Geant4 was in good agreement with the other codes (it presented an underestimation of less than 5%). The CELLDOSE code [16] – based on the EPOTRAN code – has also been compared to ETRAN and PARTRAC simulations, and with results based on analytical methods [29,30] (for ^{131}I spectrum, in water spheres with radii between 50 nm and 1500 μm), and it was shown that the obtained data were in good agreement while the analytical values were a little lower (less than 10%) and those from ETRAN and PARTRAC slightly higher (less than 10%). In this work, we focus exclusively on the accuracy of the Geant4-DNA extension.

2.2. A dedicated Geant4-DNA application

In the current work, a dedicated application code called “svalue” has been developed for Geant4-DNA, version 9.6.p01 (February 2013). In a first stage, the Geant4-DNA simulations were carried out with monoenergetic electrons from 100 eV to 20 keV. The emission is isotropic, and homogeneously distributed within nanometer size spheres of liquid water, with radii 10, 50, 100 and 1000 nm, as found in the literature [31]. The absorbed dose is scored in the sphere.

Then, in a second stage, two concentric spheres of liquid water separated by 10 μm were considered. The inner sphere radius varies between 15 μm and 250 μm , representing colloids, a component of the thyroid tissue, whereas the surrounding 10- μm thick region represents follicular cells, as found in the literature [16]. The electron emission is isotropic and distributed uniformly in the inner sphere. Emitted electrons are shot according to the emis-

sion spectrum of five isotopes of iodine (from 131 to 135), presented in [16,32]. For each spectrum, 5×10^4 incident electrons are considered, each of them corresponding to one of the following emission processes: β^- emission, Auger emission or internal conversion. The emission spectra of these five isotopes for 5×10^4 electrons are presented in Fig. 1, for long-life (^{131}I) and short-life (^{132}I , ^{133}I , ^{134}I , and ^{135}I) iodine isotopes. On this figure, processes are also distinguished. The absorbed dose is reckoned both in the inner sphere and in the surrounding region, located between the two concentric spheres.

2.3. Data processing

The S -value simulation code generates ROOT output files, which are later processed using the ROOT data analysis framework [33]. The S -values are obtained at this stage, by computing the absorbed dose per disintegration, i.e. by dividing the absorbed dose (whether the total, or the one from each process) by 5×10^4 .

In the case of iodine isotopes, we compute both the S -value from the total absorbed dose and the contribution of each process. The final values are obtained after a correction, taking into account the fact that the emission spectra also contain X-ray photons. Therefore, it is necessary to use the following correction factor:

$$S_{\text{corr}} = S_{\text{init}} \times \frac{\bar{E}_{\text{act}}}{\bar{E}},$$

where S_{init} is the absorbed dose converted to a single disintegration (i.e. divided by 5×10^4), and S_{corr} is the final corrected value, \bar{E}_{act} is the actual average released disintegration energy (considering all physical processes, including X-ray photons), and \bar{E} is the average released disintegration energy obtained from the spectrum used in the simulation code (which includes 5×10^4 electrons only, including the three emission processes). The values of those average energies as well as the correction factor $\frac{\bar{E}_{\text{act}}}{\bar{E}}$ calculated as described in reference [16] are presented in Table 2 for each iodine isotope.

2.4. Comparison method

For monoenergetic electrons, Geant4-DNA results for S -values are compared to simulation results computed with three other Monte Carlo codes, obtained either from the literature (for the in-house code MC4V developed by Emfietzoglou et al. [31]) or from dedicated simulations performed at the LAPLACE laboratory, in Toulouse (for the CPA100 code and for the PENELOPE 2011 code). Regarding isotopes of iodine, our results are compared with those obtained from EGSnrc, PENELOPE 2006, MCNP and CELLDOSE and performed specifically for this work. PENELOPE 2006 results have been obtained at the CEA-LIST laboratory in Gif-sur-Yvette, France. The use of two different versions of PENELOPE does not introduce any bias in the results because the physics remains unchanged between version 2006 and version 2011.

In both cases (monoenergetic electrons and isotopes of iodine), the comparison has been carried out by using Kolmogorov–Smirnov (KS) statistical tests. In the monoenergetic case, the statistical KS test was applied only to monotonic sections of the curve giving the dependence of the S -value as a function of the sphere radius. On the contrary, in the radionuclide case, the KS test was applied to the whole monotonous curves. In addition to the KS test, the relative difference (as a percentage) between Geant4-DNA and each code has been calculated as follows: $\text{RD} = \left(\frac{S_{\text{value}}(\text{Code})}{S_{\text{value}}(\text{Geant4-DNA})} - 1 \right) \times 100\%$. Furthermore, the results obtained with ^{131}I for the total S -value are compared to the data from Bardiès and Chatal [27].

Table 1

Summary of energy ranges for the simulation of electron transport covered by the various codes used in this study. Refer to text for further description of codes.

Code	Minimum energy	Maximum energy
Geant4-DNA	7.4 eV	1 MeV
CPA100	10 eV	200 keV
EGSnrc	~keV	100 GeV
CELLDOSE	7.4 eV	1 MeV
MCNP	1 keV	1 GeV
PENELOPE	50 eV	1 GeV

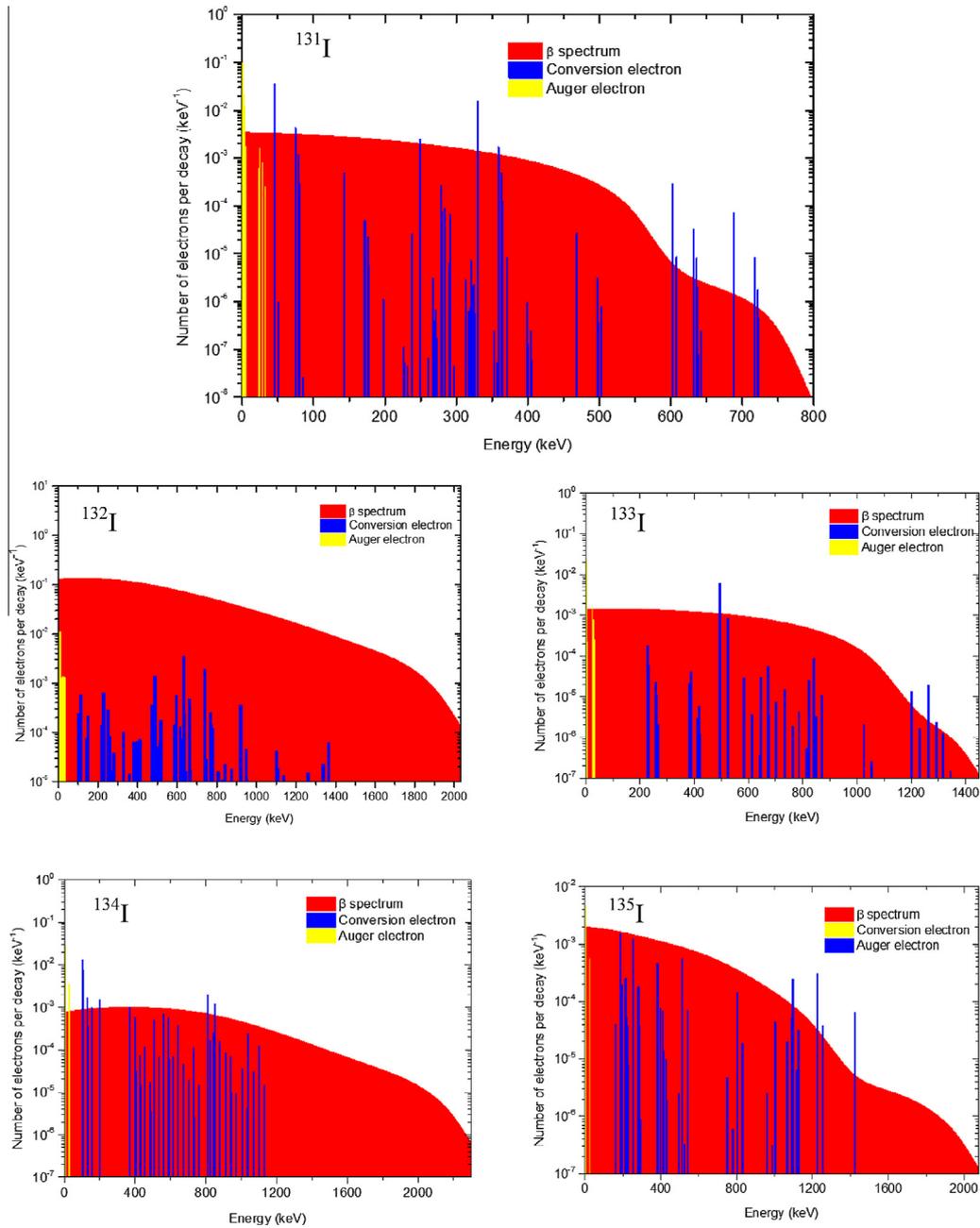


Fig. 1. Emission spectra of ^{131}I (long-life isotope), ^{132}I , ^{133}I , ^{134}I and ^{135}I (short-life isotopes). Beta continuum, Auger electrons and internal conversion electrons are distinguished.

Table 2

For each iodine radioisotope, this table presents the values of \bar{E}_{act} , the actual average released disintegration energy (considering all physical processes, including X-ray photons), and \bar{E} , which is the average released disintegration energy obtained from the spectrum used in the simulation code (which includes 5×10^4 electrons only, including the three emission processes). The correction factor is given by the ratio $\frac{\bar{E}_{\text{act}}}{\bar{E}}$.

Isotope	\bar{E}_{act} (keV)	\bar{E} (keV)	Correction factor $\frac{\bar{E}_{\text{act}}}{\bar{E}}$
^{131}I	184.9	155.4	1.19
^{132}I	498.5	461.9	1.08
^{133}I	416.1	390.5	1.07
^{134}I	630.5	556.0	1.13
^{135}I	372.7	342.7	1.09

3. Results and discussion

3.1. Monoenergetic electrons

The results obtained for monoenergetic electrons with Geant4-DNA, CPA100, PENELOPE and MC4 V [34] are presented in Fig. 2. The simulations have been carried out in liquid water spheres with radii of 10, 50, 100 and 1000 nm, and for incident energies ranging from 100 eV to 20 keV. We found that the Geant4-DNA simulations are statistically compatible with the other simulations (p -value > 0.05). The maximum disagreement (D) reaches 0.5, and is obtained between Geant4-DNA and the three other codes for a radius of 10 nm (the lowest sphere radius).

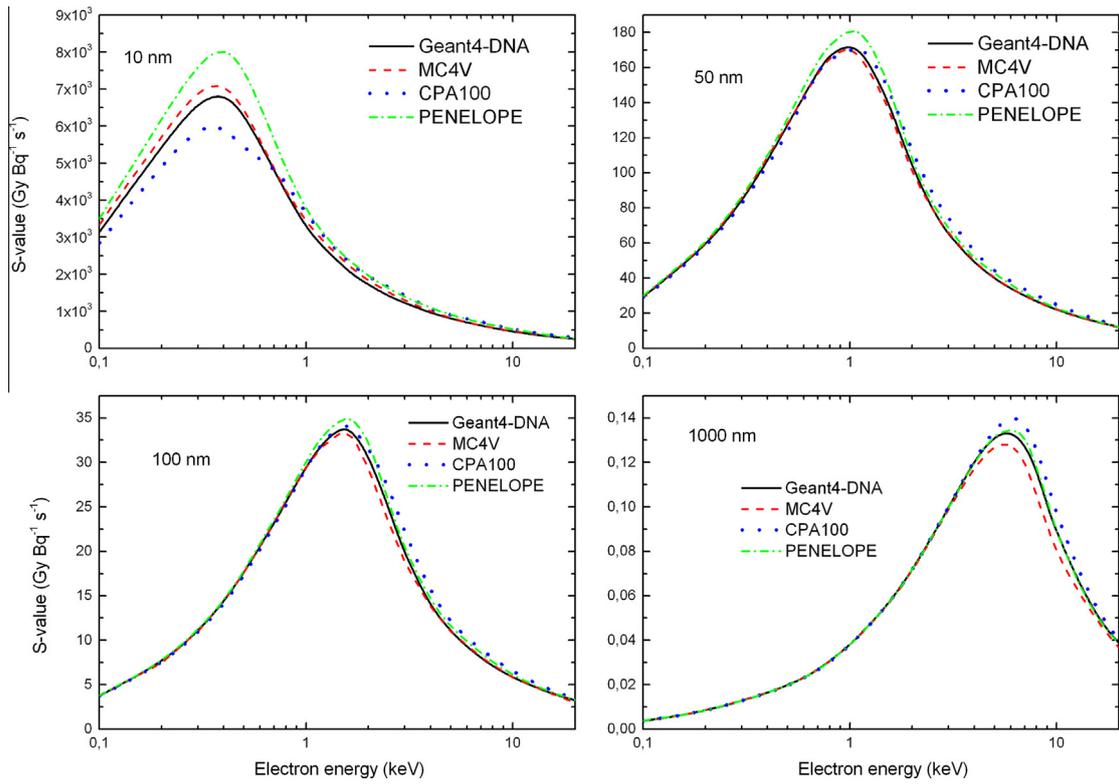


Fig. 2. Variations of S-values for monoenergetic electrons emitted in a liquid water sphere for the following radii: 10, 50, 100 and 1000 nm. Emfietzoglou et al. [34] in-house code MC4 V, CPA100 and PENELOPE are compared to Geant4-DNA.

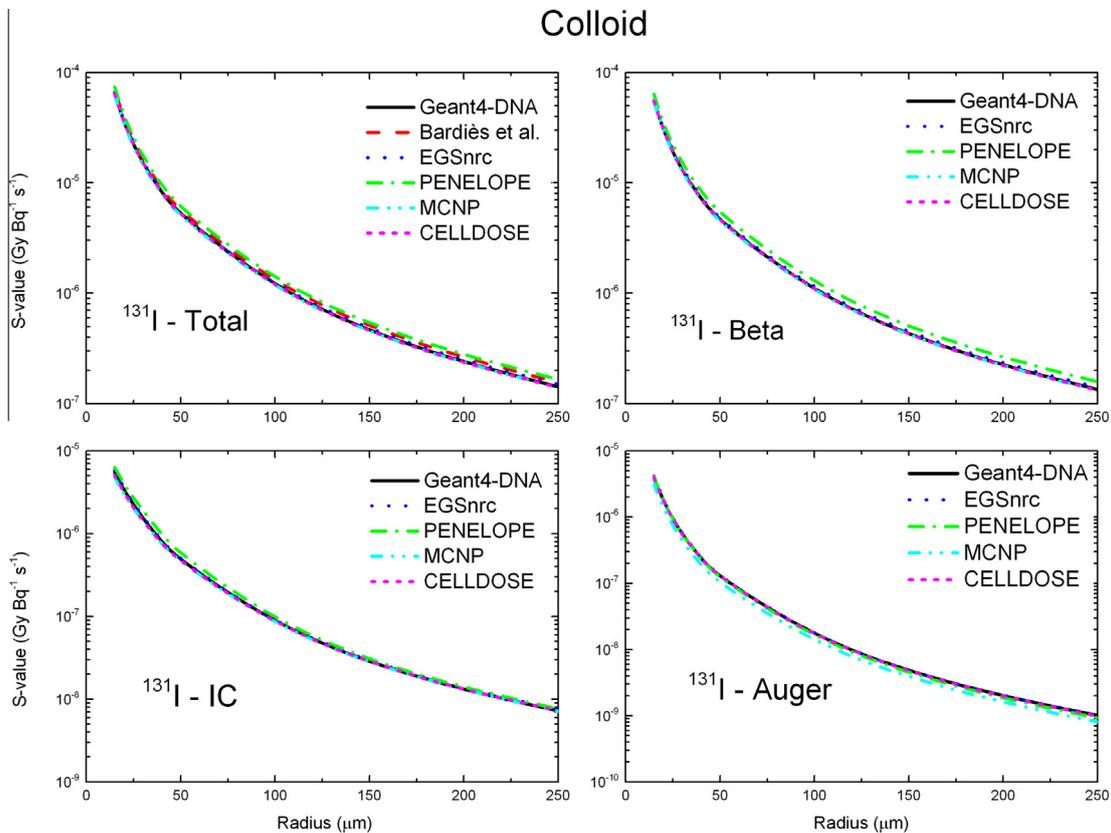


Fig. 3. Dependence of S-values obtained for ¹³¹I as a function of colloid sphere radius, varying from 10 μm to 250 μm. Geant4-DNA results are compared to EGSnrc, CELLDOSE, MCNP and PENELOPE Monte Carlo codes and to Bardies and Chatal data [27]. S-values have been calculated for all processes (top-left), beta emission (top-right), internal conversion (bottom-left) and Auger emission (bottom-right).

The corresponding relative differences between Geant4-DNA and these codes lie between -15% and $+20\%$ for all codes and energies. The best agreement with Geant4-DNA is obtained for the results of MC4V [34] (e.g. the relative differences lie between -3.6% and $+1.7\%$ for a sphere radius of 50 nm), except for a radius of 1000 nm, where PENELOPE shows a better agreement with Geant4-DNA (between -1.2% and $+3.5\%$).

3.2. Isotopes of iodine

3.2.1. Colloid case

As an illustration, S -values obtained with Geant4-DNA for ^{131}I as a function of colloid sphere radius, varying from 10 μm to 250 μm , are shown in Fig. 3. These results are compared to EGSnrc, CELLDOSE, MCNP and PENELOPE Monte Carlo codes and to Bardiès and Chatal data [27]. In this figure, S -values have been calculated for all processes (top-left plot), β^- emission (top-right plot), internal conversion (bottom-left plot) and Auger emission (bottom-right plot).

If we consider all codes, isotopes and processes, the relative difference (not shown) varies between -22.50% and $+75\%$ in some extreme cases. In most of the cases however, the difference range is much smaller, as for CELLDOSE for ^{131}I (between -8% and $+0.75\%$). Globally, Geant4-DNA matches CELLDOSE to the greatest extent for the simulations in the colloid. In some cases, however, EGSnrc (e.g. below 6.5% for ^{133}I , not graphically shown) or MCNP (e.g. mostly below 10% for ^{134}I) are closer. We can notice, especially for ^{133}I , a strong similarity in the variations for EGSnrc, MCNP and CELLDOSE. The data from Bardiès and Chatal [27] for ^{131}I in the colloid for the total S -value are from 7% up to 10% larger than those of Geant4-DNA.

3.2.2. Follicular cells case

For example, S -values obtained with Geant4-DNA for ^{134}I for follicular cells are shown in Fig. 4. These results are compared to EGSnrc, CELLDOSE, MCNP and PENELOPE Monte Carlo codes. In this figure, S -values have been calculated for all processes (top-left plot), beta emission (top-right plot), internal conversion (bottom-left plot) and Auger emission (bottom-right plot).

There is general good agreement between Geant4-DNA and all codes, which show the S -value global dependence as a function of colloid radius. However, for Auger emission, the PENELOPE results deviate from the other codes, becoming higher for large radii. We attribute this behaviour which is not observed with the other codes to a lack of statistics on Auger electrons.

In any case, for both cases (colloid and follicular cells), regarding the KS statistical tests, it was found that all p -values were larger than 0.05, confirming the overall statistical agreement with Geant4-DNA results.

4. Conclusions

The results presented in this work are part of the verification efforts to evaluate the accuracy of Geant4-DNA physics models for the transport of electrons in liquid water. We have determined S -values for monoenergetic electrons and spectra from the decay of iodine radioisotopes (^{131}I , ^{132}I , ^{133}I , ^{134}I , ^{135}I), obtained respectively in nanometer size spheres and in two geometrical descriptions of thyroid components. The results obtained with Geant4-DNA have been compared to results obtained from other Monte Carlo codes and from the literature. Kolmogorov–Smirnov tests have shown that all of them are statistically compatible with Geant4-DNA. For the monoenergetic electron spectra, the best agreement with

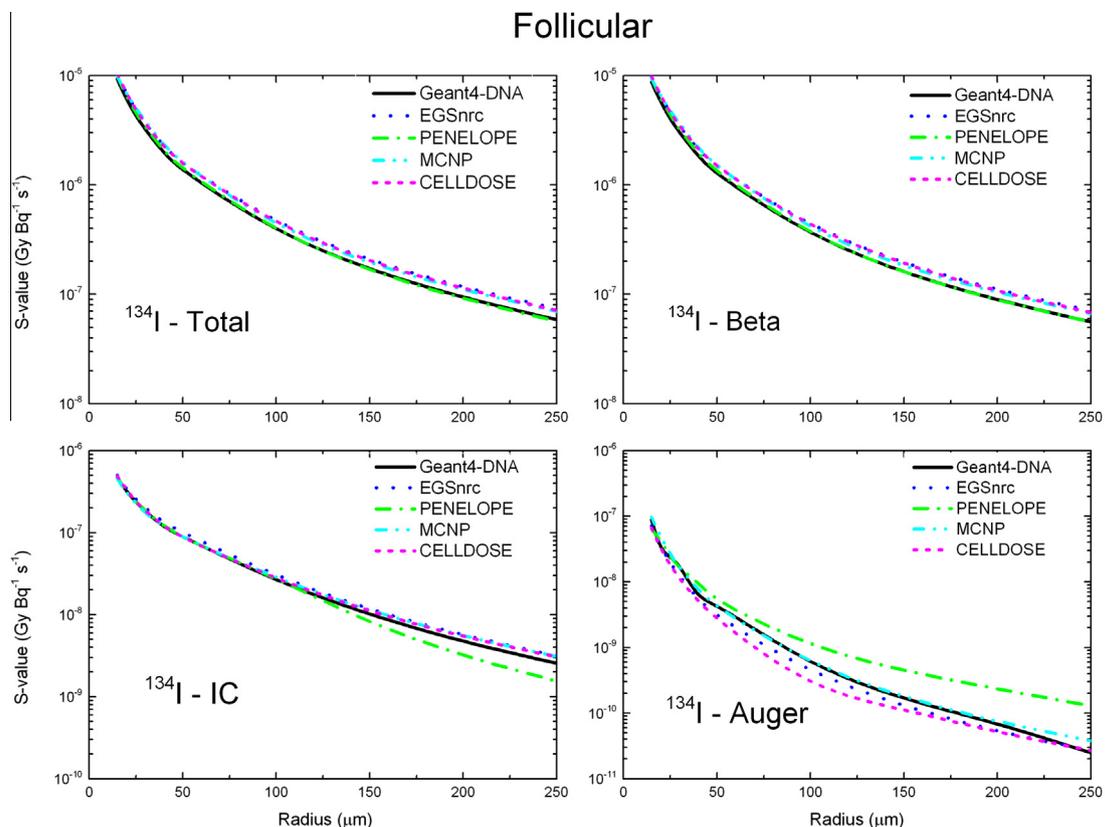


Fig. 4. Dependence of S -values obtained for ^{134}I as a function of follicular cells for radius varying from 10 μm to 250 μm . Geant4-DNA results are compared to EGSnrc, CELLDOSE, MCNP and PENELOPE Monte Carlo codes. S -values have been calculated for all processes (top-left), beta emission (top-right), internal conversion (bottom-left) and Auger emission (bottom-right).

Geant4-DNA is obtained for MC4V [34], while in the case of iodine radioisotopes calculated in the colloid, CELLDOSE results show the best agreement with the Geant4-DNA determinations. The results obtained for the follicular cell model by use of the codes in question show a general good agreement, except for Auger electrons simulated with PENELOPE at large radii. The statistical compatibility remains however verified.

Apart from specific transport parameters which the user can tune for dedicated applications, the various Monte Carlo codes used in this work adopt different theoretical and/or semi-empirical models (see [15,21–23,35,25]) in order to simulate electron physical interactions (such as ionization, electronic excitation and elastic scattering) in liquid water. Simulated *S*-values are obtained directly from the scoring of elementary energy deposition events by electrons in small size targets of liquid water. As a consequence, variations observed between the codes are mainly caused by differences in stopping powers (see for example the discussion in Section 3.1 of [36]). In a further work, it would be interesting to accurately quantify these differences in stopping powers in order to try to identify which models could be further improved.

Acknowledgements

The Geant4-DNA project receives funding from the European Space Agency under contract number AO7146-4000107387/12/NL/AK (2013–2016). It is also supported by the INSERM PhysiCancer “MICRONAUTE” project (2013–2014). Thibault André was supported by a dedicated INSERM Cancéropôle Grand Sud Ouest funding for this work, under contract number 2012140602. Filippo Morini is post-doctoral fellow from the FWO at Hasselt University. M.A. Bernal thanks the FAPESP foundation in Brazil for financing his research activities through the 2011/51594-2 project.

References

- [1] Brachytherapy: Applications and Techniques, Lippincott Williams & Wilkins, 2007.
- [2] J.P. Vuillez, Traitements à visée palliative ou curative: la radiothérapie vectorisée des tumeurs endocrines, *Médecine Nucléaire* 31 (2007) 506–513.
- [3] A.I. Kassis, S.J. Adelstein, Radiobiologic principles in radionuclide therapy, *J. Nucl. Med.* 46 (2005) 4S–12S.
- [4] J. Barbet, F. Kraber-Bodéré, A. Faivre-Chauvet, J.-F. Gustin, M. Bardiès, L. Campion, J.-F. Chatal, La radio-immunothérapie préciblée des tumeurs solides: une démarche pluridisciplinaire, *Médecine Nucléaire* 31 (2007) 498–505.
- [5] F. Buchegger, F. Perillo-Adamer, Y. Dupertuis, A. Bischof Delaloye, Auger radiation targeted into DNA: a therapy perspective, *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging* 33 (2006) 1352–1363.
- [6] F. Giammarile, F. Borson-Chazot, Traitement des tumeurs neuroendocrines par la mIBG et les peptides radiomarqués, *Pathol. Biol. (Paris)* 54 (2006) 130–136.
- [7] L. Bodei, F. Giammarile, Traitement des tumeurs neuro-endocrines par les peptides radiomarqués, *Médecine Nucléaire* 33 (2009) 142–147.
- [8] S. Brillouet, S. Dorbes, S. Silvente-Poirot, B. Mestre-Voegtli, C. Picard, M. Poirot, F. Courbon, Ciblage peptidique en oncologie nucléaire: intérêt de la modélisation moléculaire, *Médecine Nucléaire* 34 (2010) 289–294.
- [9] W.S. Snyder, M.R. Ford, G.G. Warner, S.B. Watson, *S* – absorbed dose per unit cumulated activity for selected radionuclides and organs NM/MIRD pamphlet No. 11, in: Oak Ridge National Laboratory, 1975.
- [10] W.E. Bolch, L.G. Bouchet, J.S. Robertson, B.W. Wessels, J.A. Siegel, R.W. Howell, A.K. Erdi, B. Aydogan, S. Costes, E.E. Watson, A.B. Brill, N.D. Charkes, D.R. Fisher, M.T. Hays, S.R. Thomas, MIRD pamphlet No. 17: the dosimetry of nonuniform activity distributions-radionuclide *S* values at the voxel level. Medical internal radiation dose committee, *J. Nucl. Med.* 40 (1999) 115–365.
- [11] W.E. Bolch, K.F. Eckerman, G. Sgouros, S.R. Thomas, MIRD pamphlet No. 21: a generalized schema for radiopharmaceutical dosimetry—standardization of nomenclature, *J. Nucl. Med.* 50 (2009) 477–484.
- [12] C. Champion, A. L’Hoir, M.F. Politis, P.D. Fainstein, R.D. Rivarola, A. Chetoui, A Monte Carlo code for the simulation of heavy-ion tracks in water, *Radiat. Res.* 163 (2005) 222–231.
- [13] C. Champion, C. Le Loirec, Positron follow-up in liquid water: II. Spatial and energetic study for the most important radioisotopes used in PET, *Phys. Med. Biol.* 52 (2007) 6605–6625.
- [14] C. Champion, Theoretical cross sections for electron collisions in water: structure of electron tracks, *Phys. Med. Biol.* 48 (2003) 2147–2168.
- [15] S. Incerti, A. Ivanchenko, M. Karamitros, A. Mantero, P. Moretto, H.N. Tran, B. Mascialino, C. Champion, V.N. Ivanchenko, M.A. Bernal, Z. Francis, C. Villagrasa, G. Baldacchino, P. Guèye, R. Capra, P. Nieminen, C. Zacharatou, Comparison of GEANT4 very low energy cross section models with experimental data in water, *Med. Phys.* 37 (2010) 4692–4708.
- [16] C. Champion, P. Zanotti-Fregonara, E. Hindié, CELLDOSE: a Monte Carlo code to assess electron dose distribution—*S* Values for ¹³¹I in spheres of various sizes, *J. Nucl. Med.* 49 (2008) 151–157.
- [17] S. Incerti, G. Baldacchino, M. Bernal, R. Capra, C. Champion, Z. Francis, P. Guèye, A. Mantero, B. Mascialino, P. Moretto, P. Nieminen, C. Villagrasa, C. Zacharatou, The Geant4-DNA project, *Int. J. Model. Simul. Sci. Comput.* 01 (2010) 157–178.
- [18] Z. Francis, S. Incerti, R. Capra, B. Mascialino, G. Montarou, V. Stepan, C. Villagrasa, Molecular scale track structure simulations in liquid water using the Geant4-DNA Monte-Carlo processes, *Appl. Radiat. Isot.* 69 (2011) 220–226.
- [19] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee, G. Barrand, F. Behner, L. Bellagamba, J. Boudreau, L. Broglia, A. Brunengo, H. Burkhardt, S. Chauvie, J. Chuma, R. Chytracsek, G. Cooperman, G. Cosmo, P. Degtyarenko, A. Dell’Acqua, G. Depaola, D. Dietrich, R. Enami, A. Feliciello, C. Ferguson, H. Fesefeldt, G. Folger, F. Foppiano, A. Forti, S. Garelli, S. Giani, R. Giannitrapani, D. Gibin, J.J. Gómez Cadenas, I. González, G. Gracia Abril, G. Greeniaus, W. Greiner, V. Grichine, A. Grossheim, S. Guatelli, P. Gumplinger, R. Hamatsu, K. Hashimoto, H. Hasui, A. Heikkinen, A. Howard, V. Ivanchenko, A. Johnson, F.W. Jones, J. Kallenbach, N. Kanaya, M. Kawabata, Y. Kawabata, M. Kawaguti, S. Kelner, P. Kent, A. Kimura, T. Kodama, R. Kokoulin, M. Kossov, H. Kurashige, E. Lamanna, T. Lampén, V. Lara, V. Lefebvre, F. Lei, M. Liendl, W. Lockman, F. Longo, S. Magni, M. Maire, E. Medernach, K. Minamimoto, P. Mora de Freitas, Y. Morita, K. Murakami, M. Nagamatsu, R. Nartallo, P. Nieminen, T. Nishimura, K. Ohtsubo, M. Okamura, S. O’Neale, Y. Oohata, K. Paech, J. Perl, A. Pfeiffer, M.G. Pia, F. Ranjard, A. Rybin, S. Sadilov, E. Di Salvo, G. Santin, T. Sasaki, N. Savvas, Y. Sawada, S. Scherer, S. Sei, V. Sirotenko, D. Smith, N. Starkov, H. Stoecker, J. Sulkimo, M. Takahata, S. Tanaka, E. Tcherniaev, E. Safai Tehrani, M. Tropeano, P. Truscott, H. Uno, L. Urban, P. Urban, M. Verderi, A. Walkden, W. Wander, H. Weber, J.P. Wellisch, T. Wenaus, D.C. Williams, D. Wright, T. Yamada, H. Yoshida, D. Zschiesche, G4—a simulation toolkit, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. A* 506 (2003) 250–303.
- [20] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P.A. Dubois, M. Asai, G. Barrand, R. Capra, S. Chauvie, R. Chytracsek, G.A.P. Cirrone, G. Cooperman, G. Cosmo, G. Cuttone, G.G. Daquino, M. Donszelmann, M. Dressel, G. Folger, F. Foppiano, J. Generowicz, V. Grichine, S. Guatelli, P. Gumplinger, A. Heikkinen, I. Hrivnacova, A. Howard, S. Incerti, V. Ivanchenko, T. Johnson, F. Jones, T. Koi, R. Kokoulin, M. Kossov, H. Kurashige, V. Lara, S. Larsson, F. Lei, O. Link, F. Longo, M. Maire, A. Mantero, B. Mascialino, I. McLaren, P.M. Lorenz, K. Minamimoto, K. Murakami, P. Nieminen, L. Pandola, S. Parlati, L. Peralta, J. Perl, A. Pfeiffer, M.G. Pia, A. Ribon, P. Rodrigues, G. Russo, S. Sadilov, G. Santin, T. Sasaki, D. Smith, N. Starkov, S. Tanaka, E. Tcherniaev, B. Tome, A. Trindade, P. Truscott, L. Urban, M. Verderi, A. Walkden, J.P. Wellisch, D.C. Williams, D. Wright, H. Yoshida, Geant4 developments and applications, *Nucl. Sci.* 53 (2006) 270–278. IEEE Transactions on.
- [21] M. Terrissol, A. Beaudré, Simulation of space and time evolution of radiolytic species induced by electrons in water, *Radiat. Prot. Dosimetry* 31 (1990) 175–177.
- [22] I. Kawrakow, Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. [small-caps EGS]nrc, the new [small-caps EGS4] version, *Med. Phys.* 27 (2000) 485–498.
- [23] C. Champion, C. Le Loirec, B. Stosic, EPOTRAN: a full-differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid and gaseous water, *Int. J. Radiat. Biol.* 88 (2012) 54.
- [24] J.T. Goorley, M.R. James, T.E. Booth, F.B. Brown, J.S. Bull, L.J. Cox, J.W. Durkee, Jr., J.S. Elson, M.L. Fensin, R.A. Forster, III, J.S. Hendricks, H.G. Hughes, III, R.C. Johns, B.C. Kiedrowski, R.L. Martz, S.G. Mashnik, G.W. McKinney, D.B. Pelowitz, R.E. Prael, J.E. Sweazy, L.S. Waters, T. Wilcox, A.J. Zukaitis, Initial MCNP6 Release Overview-MCNP6 version 1.0, in: 2013, pp. Medium: ED.
- [25] J. Baró, J. Sempau, J.M. Fernández-Varea, F. Salvat, PENELOPE: an algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B* 100 (1995) 31–46.
- [26] Y. Perrot, Evaluation de la dose déposée par des faisceaux d’électrons en radiothérapie dans des fantômes voxelisés en utilisant la plateforme de simulation Monte Carlo GATE fondée sur GEANT4 dans un environnement de grille, in Université Blaise Pascal – Clermont-Ferrand II, 2012.
- [27] M. Bardiès, J.F. Chatal, Absorbed doses for internal radiotherapy from 22 beta-emitting radionuclides: beta dosimetry of small spheres, *Phys. Med. Biol.* 39 (1994) 961–981.
- [28] W.B. Li, W. Friedland, E. Pomplun, P. Jacob, H.G. Paretzke, M. Lassmann, C. Reiners, Track structures and dose distributions from decays of ¹³¹I and ¹²⁵I in and around water spheres simulating micrometastases of differentiated thyroid cancer, *Radiat. Res.* 156 (2001) 419–429.
- [29] S.M. Goddu, R.W. Howell, D.V. Rao, Cellular dosimetry: absorbed fractions for monoenergetic electron and alpha particle sources and *S*-values for radionuclides uniformly distributed in different cell compartments, *J. Nucl. Med.* 35 (1994) 303–316.
- [30] S.M. Goddu, D.V. Rao, R.W. Howell, Multicellular dosimetry for micrometastases: dependence of self-dose versus cross-dose to cell nuclei on type and energy of radiation and subcellular distribution of radionuclides, *J. Nucl. Med.* 35 (1994) 521–530.
- [31] D. Emfietzoglou, K. Kostarelos, P. Hadjidakis, C. Bousis, A. Fotopoulos, A. Pathak, H. Nikişou, Subcellular *S*-factors for low-energy electrons: a comparison of Monte Carlo simulations and continuous-slowing-down calculations, *Int. J. Radiat. Biol.* 84 (2008) 1034–1044.

Chapitre 8

Outil d'aide à la décision en TDM

Grâce à l'amélioration de la résolution temporelle et spatiale, le TDM reste indiqué dans l'évaluation de nombreuses pathologies. De nouvelles techniques d'exploration permettent également de nouvelles indications. Le TDM reste toutefois une technique d'imagerie irradiante pour laquelle l'optimisation et la réduction de la dose sont primordiales.

A l'optimisation du niveau de dose absorbée par le patient est indéniablement liée l'optimisation de la QI¹ nécessaire pour poser un diagnostic efficace de la lésion ou de la maladie recherchée. En effet, une réduction drastique des doses délivrées pourrait se faire au détriment de la QI nécessaire pour réaliser le diagnostic correct. Dans ce contexte, le dispositif médical utilisé pour réaliser un diagnostic par imagerie ne répondrait plus au besoin initial.

La QI est en général définie en termes d'apparence subjective ou de caractéristiques arbitraires (contraste, bruit, ..), mais aujourd'hui, la seule définition valable de la QI dans un contexte clinique est l'estimation de la performance des observateurs dans les tâches pertinentes que sont la détection et la classification de lésions. Des études récentes ont montré que les métriques physiques traditionnellement utilisées en contrôle qualité ne sont plus en mesure aujourd'hui de décrire la QI et ce, en raison des nouveaux algorithmes de reconstruction itératifs ou autres méthodes non-linéaires de réduction du bruit utilisés dans les TDMs actuels [124, 125, 126].

L'enjeu de l'optimisation de la dose délivrée en fonction de la QI est tel que tous les grands industriels du secteur en font leur argument de vente principal. A l'heure actuelle, les TDM low-dose et même sub-Sv deviennent des options réalistes [127]. A titre d'exemple, on peut citer les systèmes *lowdose imagery by design* développés par GE Healthcare, qui affirme que ces systèmes possèdent une haute qualité d'imagerie clinique à faible dose. Siemens, quant à lui, met en avant les performances des TDMs SOMATOM®, reconnues par de nombreux experts cliniques et établissements de santé, et possédant une excellente QI avec une gestion de la radioprotection et de la réduction de la dose. Et Toshiba affirme que l'Aquilion ONE intègre les dernières technologies Toshiba permettant de réduire considérablement la dose tout en offrant une QI de très haut niveau.

Cependant, malgré ces récents développements, les performances du TDM en termes de dose délivrée et de QI restent à ce jour mal appréhendées. Les récents développements proposés par les industriels pour optimiser le niveau de dose reçus par le patient sont basés sur de nouveaux algorithmes de reconstruction et de traitement d'image pour lesquels les anciennes procédures de contrôle de la QI ne sont plus valables. De plus, les outils de management de la dose actuellement

1. Qualité Image

disponibles en routine clinique, bien qu'utiles pour limiter les dépassements de dose en particulier chez le jeune enfant, ne collectent que les indices de dose fournis par la machine, soit l'indice de dose de scanographie pondéré CTDI² et le produit dose longueur PDL³. Le CTDI, calculé sur des fantômes, est un outil permettant de connaître la dose moyenne par coupe pour une acquisition TDM. C'est un indicateur permettant de connaître la quantité de rayonnement émise. Le PDL correspond au CTDI multiplié par la longueur explorée et est un indicateur de l'énergie totale déposée. Ces deux indicateurs permettent de comparer les systèmes imageurs et les protocoles entre eux mais ils ne sont pas suffisants pour permettre une optimisation efficace des protocoles en routine clinique [128, 129]. De ce fait, malgré sa large utilisation en diagnostic, les nouveaux développements proposés par les industriels rendent encore plus complexe l'évaluation des caractéristiques physico-cliniques de la TDM. Le développement de nouvelles métriques d'estimation de la dose et de la QI est aujourd'hui primordial pour permettre une utilisation optimale de cet outil diagnostique en clinique.

Dans le cadre de sa thèse, Camille Adrien a proposé le prototype d'un outil d'optimisation des protocoles TDM (figure 8.1) prenant en compte la QI et le niveau de dose.

FIGURE 8.1 – Interface de l'outil d'optimisation proposé par Camille Adrien dans le cadre de son doctorat.

Sur la base de résultats obtenus pour différents protocoles d'acquisition sur différents fantômes, une première architecture pour la conception d'une base de données intégrant les informations sur le patient, les fantômes, la dose aux organes et l'évaluation de la qualité image a été établi. La base de données part des informations sur le patient et les relie à un fantôme en cherchant celui qui lui est le plus proche. Une fois cette liaison établie, il cherche les informations qu'il a sur les acquisitions, les doses aux organes et la qualité image. Lorsque les informations sont rassemblées, alors il peut afficher celles correspondant au choix de l'utilisateur et proposer un protocole optimisé. Au cours

2. Computed Tomography Dose Index

3. Produit Dose Longueur

de son doctorat, Camille Adrien s'est principalement focalisée sur l'estimation Monte Carlo de la dose aux organes, la QI ayant été estimé en premier lieu à l'aide d'un estimateur simplifié basé sur le critère de Rose, le but étant en effet de montrer la faisabilité de l'optimisation. Dans ce chapitre est décrit le développement et la validation de l'outil Monte Carlo utilisé pour estimer la dose aux organes lors d'examen TDM.

La thèse de Camille Adrien [101] a donné lieu à certains questionnements concernant l'estimation clinique de la QI en imagerie médicale. Suite à ses travaux de thèse, j'ai proposé un projet nommé QUADOS (pour Qualité et Dose en Scanner) à l'ANSM. Ce projet a été accepté fin 2015. Les travaux proposés dans ce projet ont pour objectif de permettre une meilleure évaluation de la performance des TDMs modernes, quels que soient les algorithmes de reconstruction ou de traitement d'image implémentés et quelle que soit la modalité appréhendée (imagerie conventionnelle à une énergie ou spectrale à deux énergies). Il y est proposé de quantifier plus précisément la dose, tout particulièrement lors de l'injection de produit de contraste iodé. La QI y est appréhendée à l'aide de métriques reproduisant les compétences d'observateurs humains expérimentés. De plus, des protocoles simples réalisés sur fantômes sont proposés afin de permettre un transfert facile en routine clinique, et ce pour guider les professionnels dans l'optimisation des protocoles d'acquisition en TDM.

ARTICLE

A new Monte Carlo tool for organ dose estimation in computed tomography

C. Adrien¹, C. Le Loirec^{1,*}, S. Dreuil² and J.-M. Bordy¹

¹ CEA, List, 91191 Gif-sur-Yvette, France.

² Service de physique médicale, Gustave-Roussy, 94805 Villejuif, France.

Received: 18 March 2019 / Accepted: 21 February 2020

Abstract – The constant increase of computed tomography (CT) exams and their major contribution to the collective dose led to international concerns regarding patient dose in CT imaging. Efforts were made to manage radiation dose in CT, mostly with the use of the CT dose index (CTDI). However CTDI does not give access to organ dose information, while Monte Carlo (MC) simulation can provide it if detailed information of the patient anatomy and the source are available. In this work, the X-ray source and the geometry of the GE VCT Lightspeed 64 were modelled, based both on the manufacturer technical note and some experimental data. Simulated dose values were compared with measurements performed in homogeneous conditions with a pencil chamber and then in CIRS ATOM anthropomorphic phantom using both optically stimulated luminescence dosimeters (OSLD) for point doses and XR-QA Gafchromic[®] films for relative dose maps. Organ doses were ultimately estimated in the ICRP 110 numerical female phantom and compared to data reported in the literature. Comparison of measured and simulated values show that our tool can be used for a patient specific and organ dose oriented radiation protection tool in CT medical imaging.

Keywords: Monte Carlo simulation / computed tomography / organ dose

1 Introduction

Due to the significant rise of computed tomography (CT) exams in the past few years and the resulting increase of the collective dose (Kalender, 2014), patient dose in CT imaging has become a subject of interest in public health, especially for children (Akhlaghi *et al.*, 2015; Journy *et al.*, 2017a, 2017b; Habib *et al.*, 2019). Considerable efforts have thus been made these past few years to manage radiation dose in CT (Coakley *et al.*, 2010; Amis, 2011, Sodickson, 2012; Mayo-Smith *et al.*, 2014). However CT protocols are still traditionally optimized using the CT dose index (CTDI), which is not representative of the patient dose (McCollough *et al.*, 2011; Kalender, 2014). Patient-specific dose reports, including absorbed dose to organs, should thus be suitable for individualized protocol optimization. Because absorbed dose to organ cannot be directly measured, some research groups attempt to adapt the treatment planning system (TPS) used in radiation therapy for kV X-ray beams dosimetry. For example, Alaei *et al.* (2000) investigated the accuracy of a convolution/superposition TPS for predicting kV beam dosimetry, but they reported dose discrepancies up to 145% in the region surrounding bone

heterogeneities. Others groups developed specific software based on precomputed Monte Carlo (MC) data, such as CT imaging¹ (Kalender *et al.*, 1999) and ImPact². Axial or helical protocols are included in these software, but large discrepancies can occur for helical acquisitions, since doses are approximated from contiguous axial scan. Instead of approximating dose from precomputed MC data, other research groups developed their own MC software to directly estimate organ dose using computational patient models or patient DICOM images as inputs.

Most of the time, code benchmarking was performed using either a CTDI phantom (Jarry *et al.*, 2003; DeMarco *et al.*, 2005; Deak *et al.*, 2008) or a custom-designed cylindrical phantom which enables dose measurements at seven different radial distances from its central axis (Li *et al.*, 2011). That approach has some limitations because standard and custom-made phantoms are made of PMMA and only permit dose measurements at selected distances from the central axis. Impact of heterogeneities and 2D dose gradients cannot be estimated with such phantoms. Due to the limitations of validation in homogeneous conditions, benchmark in

*Corresponding author: Cindy.LELOIREC@cea.fr

¹ <http://ct-imaging.de/en/ct-software-e/impactdose-e.html>.

² <http://www.impactscan.org/>.

anthropomorphic conditions is mandatory. For that purpose, DeMarco *et al.* (2005) put MOSFET detectors on the surface of a male anthropomorphic phantom, while Deak *et al.* (2008), as well as Li *et al.* (2011), choose to insert TLD (ThermoLuminescent Dosimeter) chips into Alderson-Rando phantom.

In this work, we present the dosimetric validation of a MC tool based on Penelope (Sempau *et al.*, 2003) by comparing simulated and experimental dose estimations. Without any detailed information provided by the manufacturer, the CT scanner was first modelled only using information provided by the manufacturer technical note and the method proposed by Turner *et al.* (2009). In a first step, the model has been validated in homogeneous conditions by comparing experimental and simulated integrated dose obtained with a pencil chamber. Simulated and measured CTDI values have also been compared. Then point dose measurements in an anthropomorphic phantom, using optically stimulated luminescence detectors (OSLD), were compared with simulated dose values. Dose distributions in the phantom were also measured with Gafchromic XR-QA2 films and compared with the simulated dose distributions to validate the calculated dose gradient in anthropomorphic conditions.

Although anthropomorphic validations are mandatory, they require a detector with weak energy dependence and an accurate calibration for the energy spectra involved in CT. Such conditions are not met nowadays with ionization chamber used in CT. Calibrations are usually performed for one normalized spectrum with uncertainties higher than 3–5% and without any correction factor for other beam qualities. Therefore, given the high number of parameters influencing the measurements and their high uncertainties (about 10% for device parameters such as mAs), 20%-differences between simulated and measured results are generally considered as a good approximation of the real situation and were chosen in the present study as the success criterion.

Finally, as an application case of the tool, we estimated organ doses with a numerical anthropomorphic phantom.

2 Monte Carlo simulation

2.1 CT scanner

The VCT Lightspeed 64 CT scanner (GE Healthcare, Waukesha, WI) is a third-generation scanner. As specified in the technical note, focal spot to isocentre distance is 541 mm. Target is a tungsten-rhenium alloy with a 7 degree tilt angle regarding to reference axis. Dual focal spots are used depending on current and voltage values. According to IEC 60336, small focal spot is 0.7 mm × 0.6 mm and large focal spot is 0.9 mm × 0.9 mm. The beam full width at half maximum (FWHM) is adapted as a function of the focal spot size and the chosen aperture. For a 40 mm beam aperture, the FWHM are 42.6 and 42.9 mm for the small and the large focal spots, respectively. Use of bowtie filter is related to a maximum Scan Field of View (SFOV). The maximum SFOV is 32 cm for the small bowtie filter reported as “Ped Body” and 50 cm for the large bowtie filter reported as “Large Body”. Two tube potentials (100 and 120 kVp), two bowtie filters (“Ped Body” and “Large Body”) and a 40 mm beam collimation are modelled and presented in this work.

Table 1. Filtration of the studied beams.

Potential (kVp)	SFOV (cm)	Total filtration (inherent + central bowtie filtration) (mm Al)
100	50	5.20
120		4.65
100	32	3.44
120		2.89

2.2 CT model

The 2006 release of the MC code Penelope (Sempau *et al.*, 2003) is used to model the VCT Lightspeed 64 CT scanner (GE Healthcare, Waukesha, WI).

For MC simulations, all elements of the X-ray tube need to be modelled. Without any detailed information provided by the manufacturer, filtration elements are modelled by adapting the experimental method described by Turner *et al.* (2009). Based on an initial soft spectrum and experimental data, this method provides information on equivalent inherent filtration and equivalent bowtie filter shapes, which reproduce the attenuation of the real filtration elements. These filtration elements are reported in Table 1. For the bowtie filter only, the central filtration is indicated but the complete equivalent shape is taken into account in the simulation.

One of the specificities of CT scanner is the tube motion of the gantry during the acquisition. Both scanning modes, axial and helical, associated with a specific tube path, have to be carefully implemented into the MC tool. For that purpose, a specific source is defined. Instead of using a direct sampling of particles along the tube path and a limited particle splitting (Li *et al.*, 2011), it was taken advantage of the symmetries in geometry to implement a pipe shaped source with two variance reduction techniques: a circular splitting and a translational one.

The different elements of the X-ray tube are modelled with Penelope according to the manufacturer technical note³ and to Turner method (Turner *et al.*, 2009) for the filtration. A PSF is created below the bowtie filter at 15 cm from the focal spot (Fig. 1). This PSF contains all the relevant information required to perform the simulation: position, direction, energy, statistical weight, particle type. Each stored particle is read, split and released for simulation.

For the circular splitting, the initial particle is splitted in NC particles. Each splitted particle is sampled on an arc of circle by a random angle (φ) in the interval $[2\pi \times i/NC; 2\pi \times (i+1)/NC]$ with i between 0 and $(NC-1)$. User can define NC knowing that a large NC improves the statistics but increases the computation time and might introduce bias in the simulation results. For both scanning modes, X and Y particle coordinates are modified, with X and Y axes the transverse and vertical directions, respectively. In axial mode simulation, the Z coordinate remains unchanged. On the contrary, for helical acquisition, the Z coordinate is modified according to equation (1):

$$z' = z + \varphi/2\pi \times \text{pitch} \times \text{collimation}. \quad (1)$$

³ LightSpeed™ VCT – Technical Reference Manual.

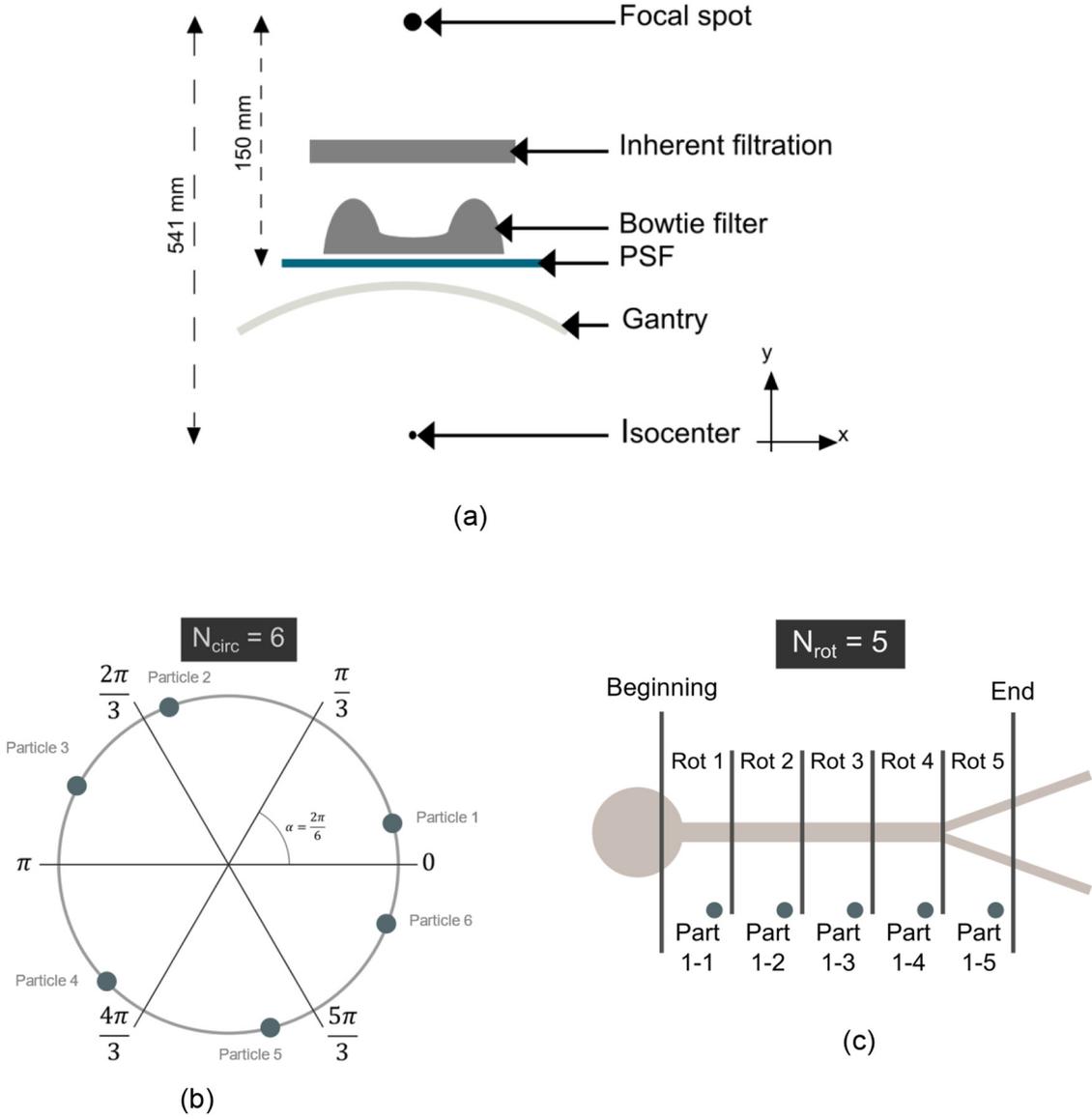


Fig. 1. Information about the CT geometry (a), the PSF location (a), the circular splitting (b) and the longitudinal splitting (c).

Once the circular splitting is realized, each particle is splitted a second time in N_R particles for the translational splitting. The N_R value is determined according to the acquisition parameters as:

$$N_R = \frac{\text{total explored length}}{\text{pitch} \times \text{collimation}}, \quad (2)$$

so that it allows a complete covering of the scanning range along the Z axis. The new Z coordinate is then determined according to equation (3), placing each N_R particle on a gantry rotation.

$$z'' = z' + i \times \text{pitch} \times \text{collimation} \text{ with } i \in [0, N_R]. \quad (3)$$

Due to the lack of information regarding the tube starting position, which is known to largely influence dose results

(Zhang *et al.*, 2009), a unique tube path cannot be determined. Choosing only one tube path can undeniably lead to a dose underestimation/overestimation for some peripheral organs if the real tube motion is largely different of the simulated path. Because a dose underestimation cannot be considered as this tool is designed for radiation protection purposes, choice is made to simulate every possible path. In such a way, dose is systematically overestimated because all peripheral organs will “see” the tube along its path. Tube starting angle is thus randomly chosen for each initial particle.

2.3 Analysis of MC data

The tube loading information is used to normalize MC results. The tube loading can be related to a number of emitted electrons (Ne) according to equation (4), where I represents the CT scanning current expressed in ampere, t the acquisition

Table 2. MC simulation parameters used for the homogeneous acquisitions.

Material	E_{abs,e^-} (eV)	$E_{\text{abs,photons}}$ (eV)	E_{abs,e^+} (eV)	C1	C2	W_{CC} (eV)	W_{CR} (eV)
Air	10^3	10^2	10^4	0.05	0.05	10^2	10^2
PMMA	10^3	10^2	10^4	0.05	0.05	10^2	10^2

time expressed in second, and e the electron elementary charge expressed in coulomb.

$$N_e = \frac{I(\text{A}) \times t(\text{s})}{e}. \quad (4)$$

Emitted primary electrons are actually related to the simulated primary showers in the MC simulation.

2.3.1 Deposited energy in a volume

To validate the MC model in homogeneous conditions a RadCal 10X6-3CT pencil chamber (RTI electronics) is used and modelled as a 10 cm length cylinder. The cylinder radius is the one reported in the chamber documentation. The parameters used for the simulations are reported in Table 2. Elastic-scattering parameters $C1$ and $C2$ are set to 0.05 to have simulations with the highest precision. Values of the cut-off energies W_{CC} and W_{CR} are fixed at 100 eV. Absorption energies of 100 keV for electrons and positrons are compatible with the volume of detection as the range of a 100 keV electron is about 0.15 mm in water.

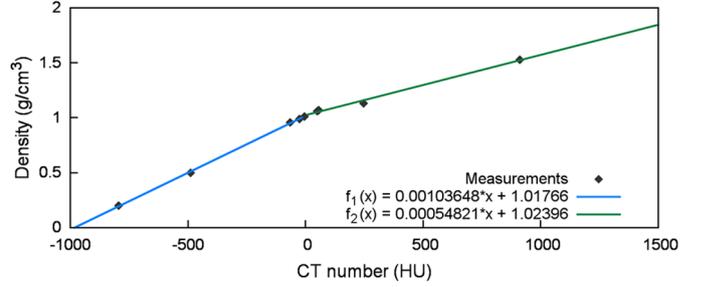
To simulate acquisitions realized with this pencil chamber, integrated dose in the pencil beam is estimated as:

$$DI = \frac{E \times I \times t \times L}{\rho_{\text{air}} \times V \times 10^{-3}}, \quad (5)$$

with DI the integrated dose (in Gy.cm), E the mean deposited energy (in eV/shower) obtained with the MC simulation in the volume represented the pencil chamber, I the scanning current (in A), t the acquisition time (in s), L the chamber length (in cm), ρ_{air} the air density (in g/cm³) and V the chamber volume (in cm³).

Uncertainty on the estimated DI is evaluated combining the contributions to the uncertainty budget using the so called ‘‘sandwich law’’ described in the guide to the expression of uncertainty in measurement (ISO/IEC Guide 98-3:2008):

$$\begin{aligned} u_c^2(DI) &= \left(\frac{I \times t \times L}{\rho_{\text{air}} \times V \times 10^{-3}} \right)^2 \times u^2(E) \\ &+ \left(\frac{E \times t \times L}{\rho_{\text{air}} \times V \times 10^{-3}} \right)^2 \times u^2(I) \\ &+ \left(\frac{E \times I \times L}{\rho_{\text{air}} \times V \times 10^{-3}} \right)^2 \times u^2(t) \\ &+ \left(\frac{E \times I \times t}{\rho_{\text{air}} \times V \times 10^{-3}} \right)^2 \times u^2(L) \\ &+ \left(\frac{E \times I \times t \times L}{\rho_{\text{air}} \times V^2 \times 10^{-3}} \right)^2 \times u^2(V). \quad (6) \end{aligned}$$

**Fig. 2.** Calibration function for the DICOM images of the CIRS phantom.

The values of the uncertainties $u(E)$, $u(I)$, $u(t)$, $u(L)$ and $u(V)$ are detailed in paragraph 2.3.3.

2.3.2 Mean dose deposited in a volume

For each CT acquisition with the anthropomorphic phantom, the DICOM images of the CIRS phantom are converted by associating to each Hounsfield Number a MC material. This conversion is done by using a calibration function determined with the CIRS Electron density phantom. The calibration function is reported in Figure 2. Only four materials are considered here: air, bone, soft tissue and lung.

For point doses comparison, the values obtained in the voxels corresponding to inserts containing OSL are compared to measurements.

For dose maps comparison, the values obtained in the pixels of the slices corresponding to the film position are compared to measurements. To do that, dose maps from film read-outs and from MC simulations are centered. As pixel size is not the same between experimental dose map (0.51 mm) and MC simulations (2.9 mm) normalized dose profiles are plotted to compare the results.

To improve the MC computation time for X-ray dosimetric purposes, secondary electrons are not tracked if their range is smaller than the considered voxel size (Deak *et al.*, 2008; Li *et al.*, 2011). The effects of this approximation have already been investigated in detail by Chao *et al.* (2001), who showed negligible differences between incorporating and omitting secondary electrons transport for diagnostic energy beams. The parameters used for the simulation respect this assumption. They are reported in Table 3 for each material.

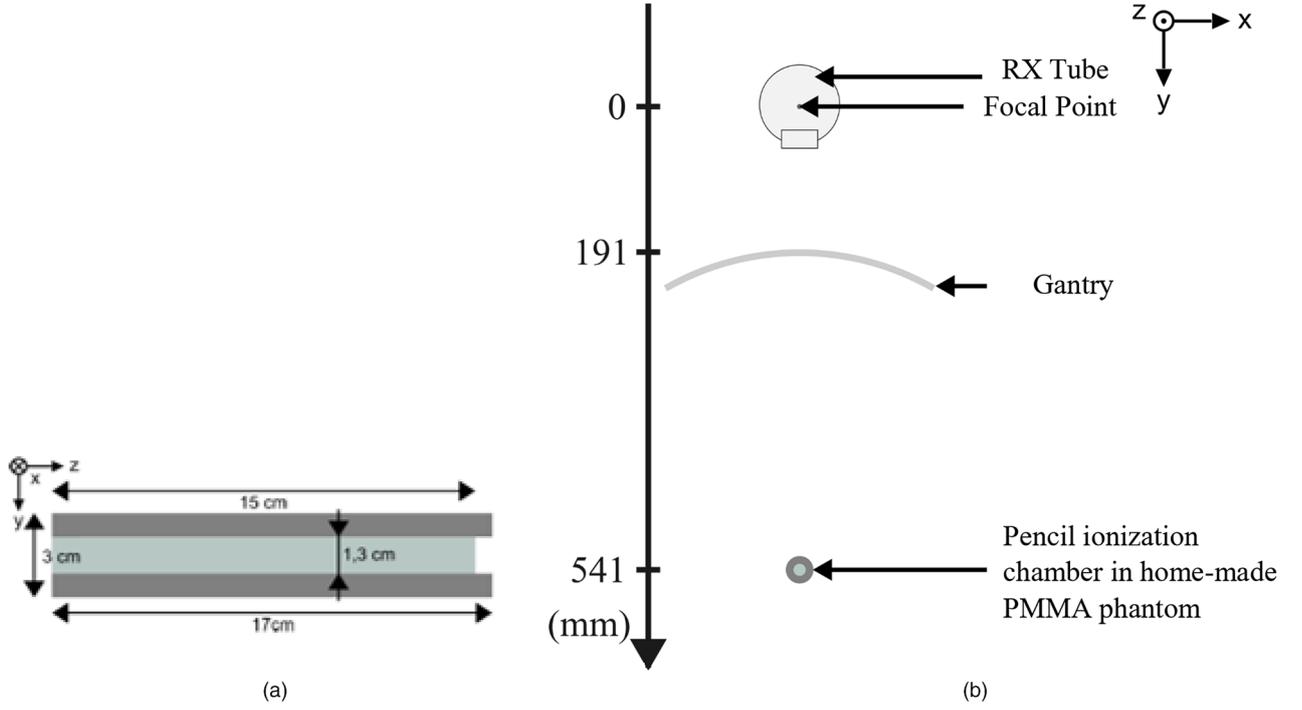
To validate the MC model in the anthropomorphic phantom, the mean dose in a voxel has to be estimated as:

$$D = D_{\text{MC}} \times I \times t \times 1000, \quad (7)$$

with D the dose in the voxel (in Gy), D_{MC} the estimated MC dose value (in eV/g/shower), I the scanning current (in A) and t the acquisition time (in s).

Table 3. Parameters used for PENELOPE simulations and for each biological material used in this study.

Material	$E_{\text{abs,e-}}$ (eV)	$E_{\text{abs,photons}}$ (eV)	$E_{\text{abs,e+}}$ (eV)	C1	C2	W_{CC} (eV)	W_{CR} (eV)
Air	2×10^5	10^2	2×10^5	0.05	0.05	10^2	10^2
Lung	2×10^5	10^2	2×10^5	0.05	0.05	10^2	10^2
Soft tissue	2×10^5	10^2	2×10^5	0.05	0.05	10^2	10^2
Bone	2×10^5	10^2	2×10^5	0.05	0.05	10^2	10^2

**Fig. 3.** Longitudinal section of the PMMA phantom (a) and experimental set-up diagram (b).

Uncertainty on the estimated D is also evaluated combining the contributions to the uncertainty budget using the so called “sandwich law” described in the guide to the expression of uncertainty in measurement:

$$u_c^2(D) = u^2(D_{MC}) \times (I \times t \times 1000)^2 + u^2(I) \times (D_{MC} \times t \times 1000)^2 + u^2(t) \times (D_{MC} \times I \times 1000)^2. \quad (8)$$

The values of the uncertainties $u(D_{MC})$, $u(I)$ and $u(t)$ are detailed in paragraph 2.3.3.

2.3.3 Uncertainty budget

The stochastic uncertainties $u(E)$ and $u(D_{MC})$ due to MC simulation vary for each simulation. It is given with a coverage factor $k=3$. Uncertainty of the current ($u(I)$) and the acquisition time ($u(t)$) are given in the technical note of the CT:

$$u(I) = \mp (10\% + 0.5 \text{ mA}), \quad (9)$$

$$u(t) = \mp (5\% + 10 \text{ ms}). \quad (10)$$

However, the confidence interval associated with these uncertainties is not specified. According to the recommendations of the guide for the expression of measurement uncertainty, we decided to consider that the uncertainties were expressed for a confidence interval of $k=1$ and that the variable follows a uniform probability law. No information about $u(V)$ and $u(L)$ are given. According to the accuracy needed to build such ionization chamber, we assume that these uncertainties can be considered as negligible.

Uncertainties are combined with the same confidence interval. In the following they are presented at $k=2$, *i.e.* with a confidence interval of $\approx 95\%$.

It is also considered that all the variables are independent that is to say that the covariance is not taken into account, this can lead to overestimate the uncertainties. It is assume that this overestimate is not large.

3 Model validation in homogeneous conditions

3.1 Isocenter validation

Integral of the air kerma over 100 mm is measured with a 10X6-3CT Radcal pencil ionization chamber (Fig. 3a). The

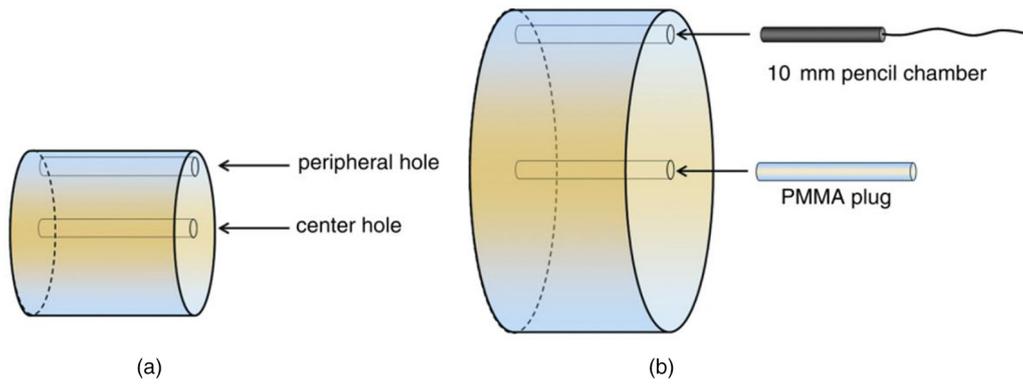


Fig. 4. Layout of the head (a) and body (b) phantoms used for measuring $CTDI_W$.

chamber is introduced into a home-made PMMA tube of 3 cm exterior diameter. Acquisitions have been performed at 100 kVp and 120 kVp, with both bowtie filters, a 40 mm nominal collimation, a 50 cm beam length, 300 mAs and the X-ray tube positioned at the top of the gantry (Fig. 3b).

3.2 “Air kerma” index validation

“Air kerma” index is a dose metric of the CT which represents the amount of radiations emitted per rotation of the RX tube. To determine “air kerma” index, two cylindrical phantoms (Fig. 4) composed of one central inserts and 4 peripheral inserts are used:

- the “head phantom” (Fig. 4a) has a diameter of 16 cm. It is used to calculate the air kerma index for head and children CT acquisitions;
- the “body phantom” (Fig. 4b) has a diameter of 32 cm. It is used to determine the air kerma index for body CT acquisitions.

The air kerma index $CTDI_W$ (for Weighting Computed Tomographic Dose Index) is defined as:

$$CTDI_W = \frac{1}{3} (C_{PMMA,100,c} + 2 \times C_{PMMA,100,p}), \quad (11)$$

with $C_{PMMA,100,c}$ being the value of the air kerma index obtained when the pencil chamber is localized in the central location and $C_{PMMA,100,p}$ being the mean value of the air kerma index when the pencil chamber is inserted in the 4 peripheral locations.

Acquisitions have been performed at 100 kVp and 120 kVp and for a 40 mm nominal collimation. The bowtie filter corresponding to the phantom has been used, thus the Ped Body filter for the head phantom and the Large Body filter for the body phantom. All acquisitions have been performed with the Radcal pencil chamber, 600 mA and an acquisition time of 1 s. The phantom is positioned at the CT isocenter. The pencil chamber is positioned in one of the insert while the other inserts are filled with PMMA cylinders. Five acquisitions are needed to get the air kerma index in the 5 inserts of each phantom.

Table 4. Acquisitions performed experimentally and with the MC simulation to estimate point dose values.

kVp	Bowtie filter	Pitch	mAs
100	Large	0.984	570
		1.375	750
	Ped	0.516	95
120	Ped	0.984	150

3.3 Uncertainty budget

Measurements uncertainties are evaluated from information reported in the AIEA report 457 about the dosimetric practice in diagnostic imaging (IAEA-TRS 457). Scenario 1 has been chosen to estimate the uncertainty budget (IAEA, 2007). In this scenario, the device is used in conformity with the CEI 61674 norm. According to the data reported in the AIEA report and to the fact that the pencil chamber is inserted in a PPMA phantom, experimental results are presented with a relative uncertainty of 13.3%.

4 Model validation in clinical conditions

Several acquisitions (Tab. 4) are performed combining different parameters (high voltage, pitch, SFOV).

4.1 CIRS anthropomorphic phantom

The ATOM adult female phantom from CIRS is used to perform measurements with optically stimulated luminescence dosimeters (OSLDs). This phantom has slots in different localizations and tissues to insert OSLDs (Fig. 5). In Table 5 are reported the positions of the inserts in which OSLDs have been inserted for both acquisitions (head and thorax).

4.2 OSL dose assessment

In their review, Yukihara and McKeever (2008) show the possibility of using OSLD for CT dosimetry. The great advantages of these detectors are their uniformity in sensitivity

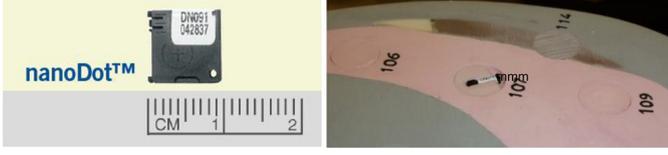


Fig. 5. Photo of an OSLD on the left and photo of an OSLD inserted in a CIRS phantom slot on the right.

Table 5. OSLD locations in the anthropomorphic phantom for thorax and head acquisitions.

	Location	Tissue	Section	Position
Thorax	Stomach	Soft tissue	21	137
	Right Lung	Lung	20	107
	Spine	Bone	19	102
	Heart	Soft tissue	16	83
	Rib	Bone	15	69
Head	Brain	Soft tissue	3	6
	Skull	Bone	3	10
	Mandible	Bone	7	18
	Thyroid	Soft tissue	10	28

because the $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ powder used in the production process is a homogenized mixture of different crystal growth runs. The NanoDot™ (Landauer Inc.) contain single circular OSLD (5.0 mm in diameter) placed in an adapter. An effective depth of 0.1 g/cm^3 is assumed as the point of measurement. Yukihiro and McKeever mention the OSLD energy dependence, showing variations between 20 and 30% for potentials ranging from 80 to 140 kVp. We have thus developed a specific user guide to take into account this energy dependence.

4.2.1 Detector calibration

The read-out is performed with the semi-automatic reader MicroStar™ NanoDot™ system. Depending on the dose level, two light intensities are possible: for low doses ($< 200 \text{ mGy}$) all 38 LEDs are used and for high doses only 6 LEDs are used. For our application, the reader is always used in the low dose regime.

A calibration of our own OSLD has been carried out on a range from 0 to 150 mGy. Five radiation qualities (^{137}Cs source, ^{60}Co source, RQR 4, RQR 6 and RQR 9 [NF EN 61267 Norm]), available at the French national metrological laboratory (Laboratoire national Henri Becquerel, LNHB), are used. Five detectors have been irradiated for each air kerma value. Average OSLD readings are used to calculate the calibration factor for each beam quality, assuming that OSLD response is linear in terms of air kerma. Results are reported in Table 6.

4.2.2 Detector read-out analysis

Irradiated OSLD, used for measurement, as well as non-irradiated OSLD, are read three times. Mean reading values for irradiated (r_I) and non-irradiated OSLD (r_{NI}) are then computed. These mean raw reading values are then corrected

Table 6. Calibration function (OSLD reading as a function of air kerma) obtained for the different beam qualities.

Beam quality	Calibration function
RQR 4	$R = 6781.4 \times K_a + 2475.5$
RQR 6	$R = 6210.6 \times K_a + 2528.5$
RQR 9	$R = 5551.5 \times K_a + 2647.1$
^{137}Cs	$R = 2007.6 \times K_a + 2573.1$
^{60}Co	$R = 1949.6 \times K_a + 2531.6$

individually from the OSLD sensitivity (se) to obtain the real reading value for irradiated (R_I) and non-irradiated (R_{NI}) OSLD, respectively. Finally, the corrected signal S , used to determine the dose absorbed by the OSLD is calculated by subtracting raw reading values for irradiated (R_I) and non-irradiated (R_{NI}) OSLD.

To take into account the energy dependence of the OSL detectors, protocol detailed in Bordy *et al.* (2013) is adapted. The energy spectrum corresponding to the OSL position is determined by MC simulation. Calibration factors for each energy bins are convolved using the energy spectrum as weight to adapt the calibration factor to the spectrum at the point of measurement. Assuming the electronic equilibrium condition are fulfilled, the dose in the tissue is obtained by multiplying the air kerma by the ratio of the interaction coefficients:

$$D_{\text{medium } m, Q} = K_{\text{air}, Q0} \times \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m},$$

$$\text{with } \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m} = \frac{\left(\frac{\mu_{\text{en}}}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}}{\left(\frac{\mu_{\text{tr}}}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}} Q0, \text{air}.$$

4.2.3 Uncertainty budget

For each step of the OSLD read-out, an uncertainty budget is calculated. At the end, the uncertainty associated to the absorbed dose (D) in the medium is defined as:

$$U_D^2 = U_K^2 \left[\left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m} \right]^2 + U_{(\mu_{\text{en}}/\rho)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}}^2 \left[\frac{K}{\left(\frac{\mu_{\text{tr}}}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}} \right]^2 + U_{(\mu_{\text{tr}}/\rho)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}}^2 \left[\frac{K \times \left(\frac{\mu_{\text{en}}}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m}}{\left(\frac{\mu_{\text{tr}}}{\rho} \right)_{Q0, \text{air}}^{Q, m} \cdot 2} \right]^2. \quad (13)$$

with U_K the uncertainty associated to the air kerma and defined as:

$$U_K = \left(\frac{1}{a_Q} \right)^2 \times U_S^2 + \left(\frac{-S}{a_Q^2} \right)^2 \times U_{a_Q}^2, \quad (14)$$

where U_{aQ} is the uncertainty associated to aQ the slope of the calibration function corresponding to the energy spectrum observed at the point of measurement and defined as:

$$U_{aq}^2 = \left(\frac{1}{\sum_i N_i \times E_i} \right)^2 \sum_i (N_i \times E_i \times U_{a(E_i)})^2, \quad (15)$$

and U_S is the uncertainty associated to the OSLD read-out:

$$U_S^2 = U_{R_I}^2 + U_{R_{NI}}^2, \quad (16)$$

with U_{R_I} being the uncertainty associated to the irradiated detectors and $U_{R_{NI}}$ being the uncertainty associated to the non-irradiated detectors; both of them are calculated thanks to the following equation:

$$U_{\bar{R}}^2 = \left(\frac{1}{se} \right)^2 \times U + \left(\frac{U_{\bar{F}}}{se \times se} \right)^2 \times U_{se}^2. \quad (17)$$

The uncertainty on the mass interaction coefficients is taken equal to 1%, according to the NIST ([Hubbell and Seltzer, 2009; https://www.nist.gov/](https://www.nist.gov/)).

4.3 Dose maps assessment with XR-QA films

When exposed to radiation, the organic based dye of radiochromic films changes color due to polymerization: the color of XR-QA films turns from orange to brownish-black depending on the level of exposure (see [Fig. 6](#)). Several features of these detectors have attracted the attention of the medical physics community: insensitivity to visible light, self-developing characteristics, dose-rate independence.

[Rampado *et al.* \(2006\)](#) studied the dependence of XR-QA films for kilovolt energies and they proposed a method to use these films (reading, calibration, uncertainties assessment). They also highlighted a variation of the film response with beam energy which can go up to 20%. [Boivin *et al.* \(2011\)](#) proposed also to use the films for *in vivo* dosimetry purposes in medical imaging. More recently, [Tomic *et al.* \(2014\)](#) proposed a method for calibrating and correcting the film reading. They showed that the use of a single calibration function leads to a relative uncertainty of 14% on the dose values, if the calibration function is obtained for a beam quality taken in the middle of the investigated energy range. In the following, we have considered this value for the uncertainty associated to the film analysis.

4.3.1 Film calibration

The films calibration has been carried out in the LM2S (Laboratoire modélisation, systèmes et simulation) laboratory for a 120 kVp X-ray beam with a HVL of 7.14 mm aluminum. Films and a Farmer 30013 PTW ionization chamber have been irradiated at the same time in order to determine the air kerma associated to the film read-out. The Farmer chamber has been previously calibrated at the French national laboratory of metrology (LNHB) in terms of air kerma. Films are read before and one week after irradiation and saved as TIF files. Unirradiated film reading is also necessary to obtain net optical

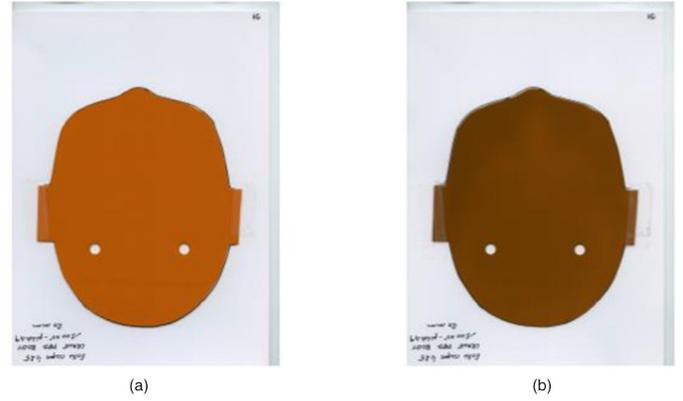


Fig. 6. Film read-out for the head acquisition: The color of XR-QA films turns from orange to brownish-black: (a) before irradiation; (b) after irradiation.

density. It is also recommended to control time between irradiation and read-out (at least 24 h). By using only the red channel, the mean pixel values before (PV_{NI}) and after (PV_I) irradiation are calculated in a mean 1 mm² region of interest. The net optical density is then defined in equation (17):

$$\text{netOD} = \log_{10} \left(\frac{PV_{NI}}{PV_I} \right). \quad (18)$$

The calibration function linking the air kerma and the netOD has been adjusted according to the following polynomial function (Eq. (18)):

$$K_{\text{air},Q0} = a \times \text{netOD} + b \times \text{netOD}^4. \quad (19)$$

As for OSLD, the dose in the tissue is obtained by multiplying the air kerma by the ratio of the mass interaction coefficients.

4.3.2 Film analysis

Gafchromic XR-QA2 films are irradiated to study the dose gradient. Films are cut to fit the anatomical shapes of the female anthropomorphic phantom and placed between two phantom slices. For thorax acquisitions, films cannot be inserted into the breasts of the phantom because breast are made from a single piece without any insert or slice. Stencil of the films contours are used to ensure the reproducibility of the film positioning during the reading steps before and after irradiation. For all acquisitions, the tube speed is fixed at 0.7 s/rot and the films are read four times before and one week after the irradiation. Films are read several times to ensure that film storage and handling have been performed in good conditions (dry and dark environment, no dust or fingerprints...). Optical density values are then converted into air kerma according to the calibration function.

A thoracic and a head acquisition ([Tab. 7](#)) have been performed.

5 Organ dose estimation

Organ doses for a thoracic localisation have then been estimated into the female phantom provided in ICRP

Table 7. Acquisitions performed experimentally and with the MC simulation to estimate dose maps.

kVp	Bowtie filter	Pitch	Position in the phantom
100	Large	0.516	Between section 16 and 17
120	Ped	1.375	Between section 7 and 8

Publication 110 (ICRP, 2009). Simulations are performed for the Large Body bowtie filter with a 50 cm SFOV, 100 and 120 kVp, a 40 mm collimation adapted to the used focal spot (42.6 and 42.9 mm), three mAs (100, 200 and 300), a 0.7 s/rot tube speed and three pitch values (0.531 – 0.969 – 1.375). Dose values to each voxel across all the voxels belonging to each organ are averaged. According to the organ wT factors reported in the ICRP 103 (ICRP, 2007), we decided to report the dose absorbed by the more sensitive organs thus the left breast glandular tissue, the stomach wall, the left pulmonary tissue, the esophagus and the spinal cord.

6 Comparison of experimental and simulated results

To compare experimental results (r_{exp} , σ_{exp}) and MC estimation (r_{MC} , σ_{MC}) we have used 2 index:

- the deviation defined as:

$$\text{dev} = \frac{r_{MC} - r_{\text{exp}}}{r_{\text{exp}}} \times 100, \quad (21)$$

- and the overlap defined as:

$$\text{ovlp} = 100 \times e^{-\frac{(r_{MC} - r_{\text{exp}})^2}{2(\sigma_{MC}^2 + \sigma_{\text{exp}}^2)}}. \quad (22)$$

7 Results

7.1 Isocenter experimental validation

Table 8 shows the measured and simulated integral of the air kerma over 100 mm. Results show a good agreement between the simulations and the measurements with a deviation less than 10% and an overlap larger than 87% for the 4 cases considered here.

7.2 Validation of the air kerma index estimation

Table 9 shows the measured and simulated integral of the air kerma index obtained with both phantoms. Results show a good agreement between the simulations and the measurements with a deviation less than 4% and an overlap larger than 89% for the 4 cases considered here.

7.3 Point dose comparison

Experimental and simulated dose values are reported in Figure 7 as well as the relation between them:

$$D_{\text{exp}} = 0.867 \times D_{\text{simul}}. \quad (23)$$

Simulated values are on average higher than the experimental ones. The uncertainty bars plotted in Figure 7 is obtained by fitting the MC uncertainty associated to each simulated values. This one is about 23.2% ($k=2$) for all the simulations performed here. The experimental uncertainty is about 7.4%.

7.4 Dose maps comparison

Experimental and simulated dose distributions for a head scan are reported in Figure 8. Large differences can be observed between the two maps and will be discussed later in the discussion section.

Validation of the dose gradient is performed by comparing simulated and experimental profiles reported in Figure 9 and obtained from Figures 8a–8d. In Figures 8 and 9, the MC uncertainty is about 3% and the experimental uncertainty about 15%. Deviations between simulations and experiments are less than 20% in bone heterogeneities. In soft tissue regions, the deviation can be higher, especially for the head acquisition. This deviation is mainly due to the path of the X-ray tube during the experimental scan which is not simulated accurately in the MC simulation, the initial position of the tube being experimentally unavailable.

7.5 Organ dose estimation

Organ doses for the Large Body Bowtie filter, 120 kVp, 40 mm collimation, 1.375 pitch and 100 mAs, are reported in Table 10 and compared with Zhang *et al.* (2012) results, who also estimated organ dose for the female phantom described in the ICRP 110 (ICRP, 2009). They simulated in details the GE VCT LightSpeed 64 thanks to accurate data provided by the manufacturer. They used a modified version of Penelope reported in Li *et al.* (2011) to estimate organ doses in the ICRP 110 phantoms. Our results, obtained in less than one hour in 24CPU for all cases, are a little bit larger than the dose values reported by Zhang *et al.* (2012). Deviations are less than 5.8% for the four organs considered here.

8 Discussion and conclusion

Despite a lack of information about the scanner geometry, the GE VCT LightSpeed 64 has been modelled by adapting the method developed by Turner *et al.* (2009).

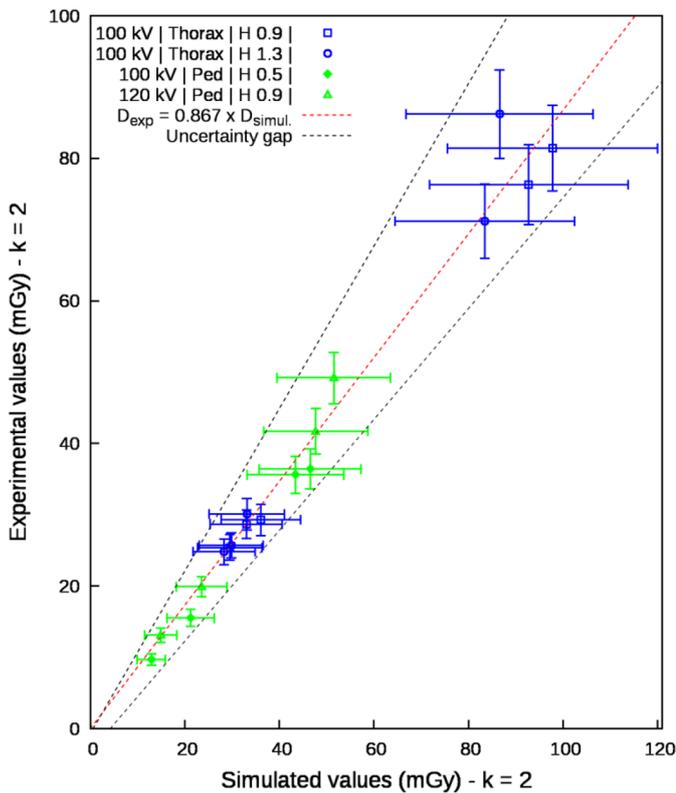
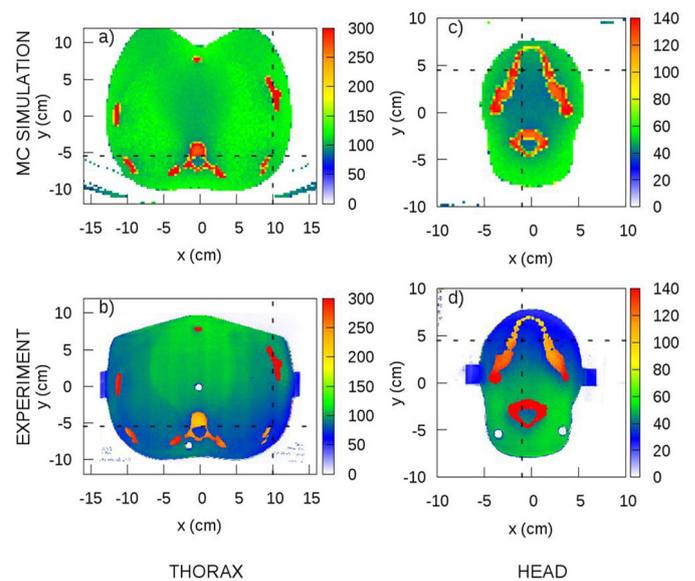
Results obtained in homogeneous conditions validate the use of the MC model for dosimetric estimation. Measured and simulated integrals of the air kerma over 100 mm are in agreement; this also validates the use of the tube load information to convert simulated results into Gray. By comparing integral of the air kerma in Table 8 and their associated uncertainties, we note that the simulation uncertainties budget is actually deteriorated by the conversion factor contribution. According to the manufacturer technical note, current and acquisition time have 10% and 5% uncertainty on the displayed value, respectively. Despite these values, relative uncertainties are below 15%. Such uncertainties are compatible with medical imaging applications.

Table 8. Measured and simulated values obtained for the integral of the air kerma in the pencil chamber.

		MC estimation	Experimental value	Comparison	
		$DI \pm UDI$ (mGy.cm)		Dev. (%)	ovlp (%)
Ped Body Bowie filter	100 kV	289.9 ± 35.1	278.6 ± 18.4	4.0	96.0
	120 kV	400.6 ± 48.4	408.2 ± 26.9	-1.9	99.1
Large Body Bowie filter	100 kV	206.7 ± 25.5	216.1 ± 14.3	-4.4	94.9
	120 kV	309.1 ± 37.8	331.4 ± 21.9	-6.7	87.8

Table 9. Measured and simulated air kerma index obtained with both phantoms.

		MC estimation	Experimental value	Comparison	
		$CTDI_w \pm UCW$ (mGy)		Dev. (%)	ovlp (%)
Ped Body Bowie filter	100 kV	76.3 ± 4.4	74.2 ± 4.9	2.8	95.0
	120 kV	112.9 ± 6.4	117.6 ± 7.8	-4.0	89.4
Large Body Bowie filter	100 kV	37.7 ± 2.6	36.5 ± 2.4	3.2	94.7
	120 kV	58.7 ± 4.0	59.0 ± 3.9	-0.5	99.8

**Fig. 7.** Experimental dose values *versus* simulated dose values and uncertainties given at $k=2$ for the head (in green) and thorax (in blue) acquisitions with the female ATOM phantom. The relation between both dose values is fitted (in red) as well as the uncertainty gap (in black).**Fig. 8.** Simulated and measured dose distributions in mGy for a head (c and d) and a thorax (a and b) scan. Dashed lines indicate the profiles used for Figure 9.

Measured and simulated point dose obtained in anthropomorphic conditions show deviations up to 15%. However confidence intervals are overlapped allowing us to conclude that results are in agreement. The uncertainty budget for simulated doses is mainly by the conversion factor uncertainties. The relative uncertainties for the tube current and the acquisition time

Table 10. Comparison of organ doses for a thoracic helical acquisition obtained with our MC tool and reported by [Zhang *et al.* \(2012\)](#).

Organs	Simulated organ doses (mGy)		Deviations (%)
	This study	Zhang <i>et al.</i> (2012)	
Esophagus	9.8 (0.003)	9.3	5.4
Lung	10.9 (0.003)	10.3	5.8
Breast	10.2 (0.002)	10.1	1.0
Stomach	11.1 (0.001)	10.9	1.8

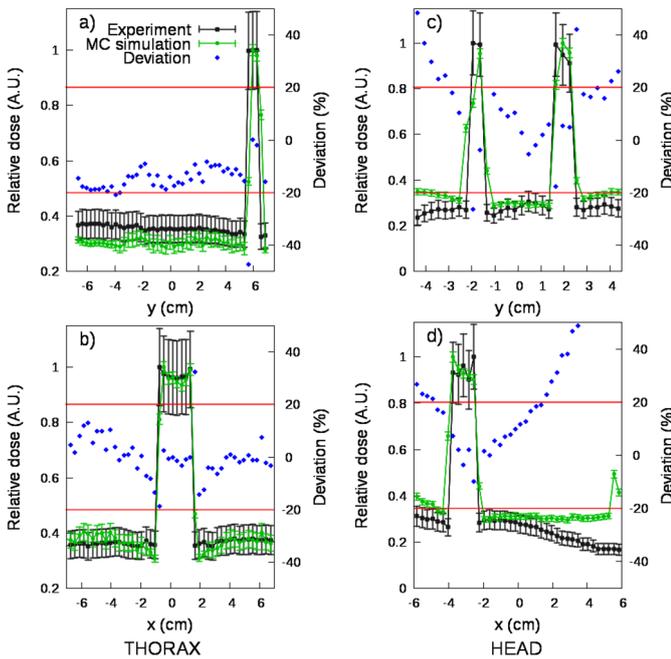


Fig. 9. Simulated and measured relative dose profiles for the head (c and d) and the thorax (a and b) acquisitions. The profiles are obtained for the dashed lines reported in [Figure 8](#). The deviation between simulation and measurement is reported in blue.

are respectively 10% and 5% at $k = 1$, as reported in the technical note. Simulated dose uncertainties might seem quite large (about 22% at $k = 2$), but such uncertainties are compatible with dosimetric purposes in medical imaging. The benefit of the conversion factor is therefore maintained.

Large differences in the simulated and the experimental dose distributions can be noted. All the experimental dose maps show an important effect of the initial tube position, as already reported by several authors ([Zhang *et al.*, 2009](#); [Li *et al.*, 2011](#)). The surface dose distribution resulting from a helical acquisition is periodic ([Dixon and Ballard, 2007](#)) and the tube start angle determines the location of the high and low dose regions. It has been reported by [Zhang *et al.* \(2009\)](#) that the magnitude of organ dose reduction resulting from varying tube start angle varies from 10 to 30% depending on the location and size of the organs. In the experimental dose

distribution, shown in [Figures 8b](#) and [8d](#), the tube position relative to the phantom slice containing the film can be easily determined, since a higher dose is delivered to the top and the back of the phantom for the thorax and the head acquisition, respectively. However, the tube path relative to the patient cannot be fully worked out because the tube starting angle information is not provided on the GE VCT Lightspeed 64 scanner. Taking into account this lack of information, it has been decided to randomly sample the tube starting angle for each simulated particle. By making this choice, all possible tube paths are simulated, leading to a more homogenous dose distribution ([Figs. 8a](#) and [8c](#)) and an overestimation for some location of the real delivered dose. Nevertheless, instead of underestimating the dose for radiosensitive organs the MC simulation considers the worst case and provides the maximum dose which could be delivered.

For directly irradiated areas there are sometimes some differences in the vicinity of bone structures. They are mainly due to the different pixel sizes between the film and the dose matrices. Due to the small number of particles, the size of the voxels in the dose matrix cannot match the size of that of the film. Indeed, the smaller the size of the voxels, the more one has to increase the number of particles to converge the simulation.

In addition to the difficulties related to the difference in resolution, the dose maps from the simulation highlight problems related to voxelization of the phantom. Since the voxels are larger than those used for the phantom, a voxel in the dose grid can be composed of several tissues (lung, bone and soft tissue in our case). If a voxel is composed of several tissues, it can be considered as being composed of an hybrid tissue associated with an intermediate density according to the densities of the materials initially present and their density. The dose deposit is then affected and the separation between the tissues is less marked. However, the dose profiles show that the gradients are still well respected.

Besides, in their article [Long *et al.* \(2013\)](#) showed from MC simulations that the starting angle could lead to organ dose differences between -20% and 34% compared to the average value. We also found such discrepancies when comparing simulations and measurements obtained with OSLD. By combining the information of Long's article and the non-homogeneous dose deposit visible on the films due to the random draw of the starting position, the important differences found in the comparison between measurement and simulation for the OSLDs can be explained.

For one studied case, organ dose estimations with our software are in agreement with those published by [Zhang *et al.* \(2012\)](#), attesting the reliability of the developed software. Organ dose estimation in the ICRP 110 phantoms can be thus performed in a short notice, less than one hour using 24CPU. In the future, improvements would be considered to reduce the simulation time.

Acknowledgments

The authors thank warmly Helena Chesneau for the calibration of the Gafchromic films and Fabien Moignau, Marc Denoziere, Nelly Lecerf, for their help in the calibration of the OSLD.

References

- Akhlaghi P, Miri-Hakimabad H, Rafat-Motavalli L. 2015. Dose estimation in reference and non-reference pediatric patients undergoing computed tomography examinations: A Monte Carlo study. *Radioprotection* 50: 43–54.
- Alaei P, Gerbi BJ, Geise RA. 2000. Evaluation of a model-based treatment planning system for dose computations in the kilovoltage energy range. *Med. Phys.* 27: 2821–2826.
- Amis ES. 2011. CT Radiation Dose; Trending in the Right Direction. *Radiology* 261: 5–8.
- Boivin J, Tomic N, Fadallah B, DeBlois F, Devic S. 2011. Reference dosimetry during diagnostic CT examination using XR-QA radiochromic film model. *Med. Phys.* 38: 5119–5129.
- Bordy JM, Bessieres I, d'Agostino E, Domingo C, d'Errico F, di Fulvio A, Knezevic Z, Miljanic S, Olko P, Ostrowsky A, Poumarede B, Sorel S, Stolarczyk L, Vermesse D. 2013. Radiotherapy out-of-field dosimetry: Experimental and computational results for photons in a water tank. *Radiat. Meas.* 57: 29–34.
- Chao TC, Bozkurt A, Xu XG. 2001. Conversion coefficients based on the VIP-Man anatomical model and EGS4. *Health Phys.* 81: 163–183.
- Coakley FV, Gould R, Yeh BM, Arenson RL. 2010. CT Radiation Dose: What can you do right now in your practice? *AJR* 196: 619–625.
- Deak P, van Straten M, Shrimpton PC, Zankl M, Kalender WA. 2008. Validation of a Monte Carlo tool for patient specific dose simulations in multi-slice computed tomography. *Eur. Radiol.* 18: 759–772.
- DeMarco JJ, Cagnon CH, Cody DD, Stevens DM, McCollough CH, O'Daniel J, McNitt-Gray MF. 2005. A Monte Carlo based method to estimate radiation dose from multidetector CT (MDCT): Cylindrical and anthropomorphic phantoms. *Phys. Med. Biol.* 50: 3989–4004.
- Dixon RL, Ballard AC. 2007. Experimental validation of a versatile system of CT dosimetry using a conventional ion chamber: Beyond CTDI [sub 100]. *Med. Phys.* 34: 3399–3413.
- Habib Geryes B, Hornbeck A, Jarrige V, Pierrat N, Ducou Le Pointe H, Dreuil S. 2019. Patient dose evaluation in computed tomography: A French national study based on clinical indications. *Phys. Med.* 61: 18–27.
- Hubbell JH, Seltzer SM. 2009. *Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients from 1 keV to 20 MeV for elements Z= 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest.* Available from <http://www.nist.gov/pml/data/xraycoef/index.cfm>.
- IAEA. Technical Reports Series no.457. 2007. *Dosimetry in diagnostic radiology: An international code of practice.*
- ICRP Publication 103. 2007. The 2007 recommendations of the International Commission on Radiological Protection. *Ann. ICRP* 37: 1–332. Pergamon Press.
- ICRP Publication 110. 2009. Adult reference computational phantoms. *Ann. ICRP* 39: 1–162. Elsevier.
- ISO/IEC Guide 98-3. 2008. *Uncertainty of measurement—Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM: 1995).* Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 100.
- Jarry G, DeMarco JJ, Beifuss U, Cagnon CH, McNittGray MF. 2003. A Monte Carlo based method to estimate radiation dose from spiral CT: From phantom testing to patient specific models. *Phys. Med. Biol.* 48: 2645–2663.
- Journe NMY, Lee C, Harbron RW, McHugh K, Pearce MS, Berrington de Gonzales A. 2017a. Projected cancer risks potentially related to past, current, and future practices in paediatric CT in the United Kingdom 1990–2020. *Br. J. Cancer* 116: 109–116.
- Journe NMY, Dreuil S, Boddaert N, Chateil J-F, Defez D, Ducou-le-Pointe H, Garcier J-M, Guersen J, Habib Geryes B, Jahnen A, Lee C, Payen-de-la-Garanderie J, Pracros J-P, Sirinelli D, Thierry-chef I, Bernier M-O. 2017b. Individual radiation exposure from computed tomography: A survey of paediatric practice in French university hospitals, 2010–2013. *Eur. Radiol.* 28: 1432–1084.
- Kalender WA. 2014. Dose in X-ray computed tomography. *Phys. Med. Biol.* 59: R129–R150.
- Kalender WA, Schmidt B, Zankl M, Schmidt M. 1999. A PC program for estimating organ dose and effective dose values in computed tomography. *Eur. Radiol.* 9: 555–562.
- Li X, Segars wP, Surgeon GM, Colsher JG, Toncheva G, Yoshizumi TT, Frush DP. 2011. Patient-specific radiation dose and cancer risk estimation in CT: Part I. Development and validation of a Monte Carlo program. *Med. Phys.* 38: 397–407.
- Long DIJ, Lee C, Tien C, Fisher R, Hoerner MR, Hintenlang D, Boch WE. 2013. Monte Carlo simulations of adult and pediatric computed tomography exams: Validation studies of organ doses with physical phantoms. *Med. Phys.* 40: 013901-1–013901-10.
- Mayo-Smith WW, Hara AK, Mahesh M, Sahani DV, Pavlicek W. 2014. How I Do It: Managing Radiation Dose in CT. *Radiology* 273: 657–672.
- McCullough CH, Leng S, Yu L, Cody DD, Boone JM, McNitt-Gray MF. 2011. CT Dose Index and Patient Dose: They are not the same thing. *Radiology* 259: 311–316.
- Rampado O, Garelli E, Deagostini S, Ropolo R. 2006. Dose and energy dependence of response of gafchromic XR-QA film for kilovoltage X-ray beams. *Phys. Med. Biol.* 51: 2871–2881.
- Sempau J, Fernandez-Varea JM, Acosta E, Salvat F. 2003. Experimental benchmarks of the Monte Carlo code Penelope. *Nucl. Instrum. Methods B* 207: 107–123.
- Sodickson S. 2012. Strategies for reducing radiation exposure in multi-detector row CT. *Radiol. Clin. N. Am.* 50: 1–14.
- Tomic N, Quintero C, Whiting BR, Aldelajjan S, Bekerat H, Liang L, DeBlois F, Seuntjens J, Devic S. 2014. Characterization of calibration curves and energy dependence GafChromic™ XR-QA2 model based radiochromic film dosimetry system. *Med. Phys.* 41: 062105.
- Turner AC, Zhang D, Kim HJ, De Marco JJ, Cagnon CH, Angel E, Cody DD, Stevens DM, Primark AN, McCollough CH, McNitt-Gray MF. 2009. A method to generate equivalent energy spectra and filtration models based on measurement for multidetector CT Monte Carlo dosimetry simulations. *Med. Phys.* 36: 2154–2164.
- Yukihara EG, McKeever SWS. 2008. Optically stimulated luminescence (OSL) dosimetry in medicine. *Phys. Med. Biol.* 53: R351–R379.
- Zhang D, Zankl M, DeMarco JJ, Cagnon CH, Angel E, Turner AC, McNitt-Gray MF. 2009. Reducing radiation dose to selected organs by selecting the tube start angle in MDCT helical scans: A Monte Carlo based study. *Med. Phys.* 36: 5654–5664.
- Zhang Y, Li X, Segars W, Samei E. 2012. Organ doses, effective doses, and risk indices in adult CT: Comparison of four types of reference phantoms across different examination protocols. *Med. Phys.* 36: 3404–3423.

Chapitre 9

Estimation de l'ambiance dosimétrique d'installations en cours de démantèlement

La simulation informatique 3D et la technologie de réalité virtuelle permettent de visualiser la dose rencontrée par les travailleurs lors des opérations de démantèlement à l'aide d'outils de calcul de dose simplifiés mais permettant une estimation en ligne du débit d'équivalent de dose. Ces outils utilisent généralement une approche macroscopique pour le calcul du débit de dose gamma, à savoir la méthode d'intégration du noyau ponctuel avec des facteurs d'accumulation. Ce modèle physique simplifié améliore les performances de calcul, mais présente également certaines restrictions. En revanche, les méthodes stochastiques Monte Carlo permettent une estimation précise du débit de dose, mais le temps de calcul est prohibitif pour les applications de dose en temps réel.

Quelque soit leur nature, stochastique ou déterministe, ces outils de calcul permettent de simuler le transport des particules dans un milieu depuis leur lieu d'émission jusqu'à leur détection en résolvant l'équation du transport de Boltzmann. Cette équation bilan reformule, sous un angle mathématique, l'égalité entre la densité de particules qui sort d'un volume V élémentaire soit :

- les particules sortant du volume élémentaire sans choc : c'est le **terme de transport**,
- les particules absorbées ou sortant du volume élémentaire suite à une diffusion : c'est le **terme d'absorption et de diffusion** pris en compte par la section efficace macroscopique totale $\Sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$);

et celle qui entre dans ce volume élémentaire, soit :

- les particules entrant dans le volume élémentaire à la suite d'une diffusion : c'est le **terme de diffusion**,
- les particules émises dans le volume depuis une source autonome : c'est le **terme source**.

On a ainsi :

$$\text{Terme de transport} + \text{Terme d'absorption et de diffusion} = \text{Terme de diffusion} + \text{Terme source}$$

soit :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d^2 \vec{\Omega}' dE' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (9.0.1)$$

L'enjeu des simulations Monte Carlo est d'estimer des grandeurs physiques telles que le débit de dose, le flux des particules ou bien encore le kerma. On appelle l'estimation de ce type de grandeur une **réponse** et elle est définie sur un sous-ensemble d'intérêt D de l'espace des phases de l'étude, autrement dit la zone du détecteur. La réponse peut s'écrire sous cette forme :

$$R(D) = \int_{P \in D} g_R(P) \phi(P) dP \quad (9.0.2)$$

où g_R est une fonction qui définit quelle grandeur on veut estimer (si $g_R(P) = 1$ alors la réponse est le flux dans D).

Les **estimateurs** sont des outils mathématiques qui fournissent des informations sur des **scores**. Un estimateur est une suite d'opérations appliquée sur un échantillon. Un échantillon est un ensemble de données fourni ici par SMC (des trajectoires de particules). Un estimateur détermine un paramètre inconnu d'une variable aléatoire (le score $\hat{R}(D)$) associée à une loi de probabilité, par exemple une espérance mathématique. Ici l'espérance du score donne la réponse de la simulation, qui représente l'estimation de la grandeur qu'on recherche à calculer : $\mathbb{E}[\hat{R}(D)] = R(D)$.

L'estimateur **Collision ou COLL** (voir figure 9.1 - a) implémenté dans TRIPOLI-4® et basé sur le nombre de collisions ayant lieu dans le volume de détection est l'estimateur dit "naturel" (il détermine l'énergie déposée à chaque interaction et correspond donc à l'histoire naturelle des particules) de la SMC. Ainsi, avec les énergies simulées et attribuées aux différentes particules, il est possible d'estimer toutes les grandeurs physiques qui nous intéressent.

L'estimateur **Track Length Estimator ou TLE** (voir figure 9.1 - b), quant à lui, établit des scores à partir de la longueur de la trajectoire que les particules effectuent à l'intérieur du volume de détection. Ces deux estimateurs, quand ils sont bien implémentés, convergent vers le même résultat, même s'ils sont basés sur différents critères.

Pour accélérer la simulation, ces estimateurs sont utilisés en combinaison avec des techniques de réduction de la variance (VRT¹), qui fonctionnent généralement bien pour les problèmes de pénétration profonde, mais pas pour les problèmes dominés par la diffusion. Il est donc nécessaire de développer un nouveau type d'algorithme capable d'aborder des configurations caractérisées simultanément par l'atténuation et la réflexion du rayonnement dans les géométries avec un pourcentage élevé de matériaux de faible densité (comme l'air) où l'absence de collisions peut limiter l'efficacité de la VRT actuelle.

Ces développements ont été réalisés dans le cadre de la thèse d'Ettore Guadagni que j'ai encadré entre Janvier 2019 et Janvier 2022. L'estimateur **exponential Track Length ou e-TLE** (voir figure 9.1 - c) déjà mis en oeuvre dans le domaine médical [24] a été étudié au cours de ce doctorat et ses performances dans des configurations typiquement rencontrées dans le domaine de l'A&D ont été estimées. L'estimateur e-TLE, de par sa formulation, ne permet pas seulement de prendre en compte la longueur de la trajectoire des particules qui traversent le volume de détection. La longueur de la trajectoire des particules n'interceptant pas le volume de détection est également considérée en comptabilisant la contribution fictive de ces particules si leur parcours leur avait

1. Variance Reduction Technique

permis de traverser ce volume. Cet estimateur permet donc implicitement d'effectuer une réduction de variance car il se base à la fois sur les trajectoires aléatoires simulées mais également sur les trajectoires hypothétiques qu'auraient pu emprunter les particules si elles s'étaient dirigées vers le détecteur [76].

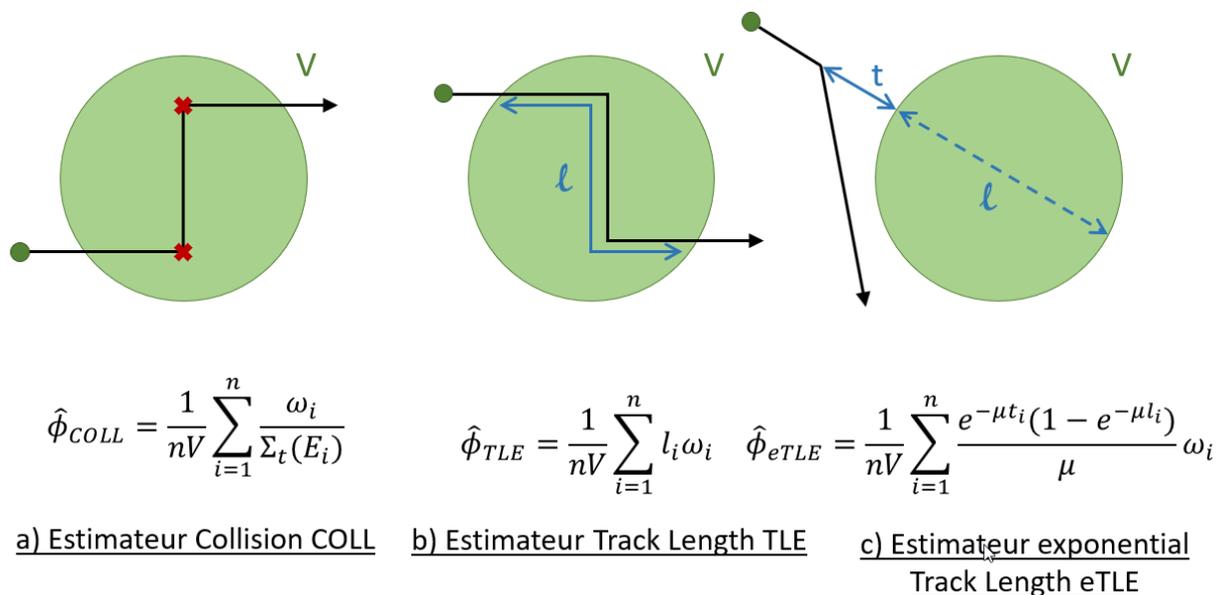


FIGURE 9.1 – Représentation schématique et mathématique des différents estimateurs

Dans le cadre de ce doctorat, deux versions de cet estimateur ont été étudiées :

- une version locale permettant l'estimation du flux de particules et du débit d'équivalent de dose pour des détecteurs ponctuels ; afin d'optimiser les performances de l'estimateur dans cette version locale, le e -TLE est utilisé de concert avec un algorithme de détection forcée ;
- une version globale permettant l'estimation de ces mêmes grandeurs à l'échelle de la configuration complète *via* l'utilisation d'un maillage fourni par l'utilisateur.

L'article joint à ce chapitre décrit l'implémentation et les performances de l'estimateur e -TLE dans sa version locale.

A new hybrid next-event estimator for photon-based Monte Carlo dose rate calculations

Ettore Guadagni¹, Cindy Le Loirec¹, Yannick Penelieu², Jean Michel Létang³, Davide Mancusi⁴ and Cheikh Diop⁴

¹ CEA, DES, IRESNE, DER, Service de Physique des Réacteurs et du Cycle, Cadarache F-13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

² CEA, IRFM, Cadarache F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

³ Univ Lyon, INSA-Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, Centre Léon Bérard, CNRS, Inserm, CREATIS UMR 5220 U1206, 69373, Lyon, France

⁴ Université Paris-Saclay, CEA, Service d'Etudes des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées, 91191, Gif-sur-Yvette, France

Received: date / Revised version: date

Abstract. This work describes the implementation of a deterministic-like straight-line transport routine inside the TRIPOLI-4[®] Monte Carlo code, aimed at developing a hybrid estimator that can speed-up the MC calculation while retaining its precision. The algorithm is based on the exponential track length estimator or e TLE, a next-event estimator that has already been investigated for medical applications. In this implementation, the e TLE is paired with a forced detection algorithm which is shown to drastically improve its performance. We describe the implementation of the method in TRIPOLI-4[®], then we present the first results obtained over some test cases and compare them with the classic track-length estimator already implemented in TRIPOLI-4[®].

1 Introduction

When planning the decommissioning and dismantling of a nuclear facility, dose rate estimation constitutes a crucial step to define operational margins and to ensure that safety limits are respected. To this aim, one can distinguish two main families of computer codes:

- The deterministic ones, like RANKERN [1] and CEA's NARMER [2], are often based on Point-Kernel Integration (PKI) method, with build-up and/or albedo factors. PKI is a macroscopic approach that consists in considering any radiation source as an ensemble of independent, beam-like point sources. These straight beams of radiation are attenuated through matter by means of macroscopic coefficients, such as the linear attenuation coefficient. The build-up and albedo factors are correction factors used to estimate the effect of scattering in matter and surface reflection, respectively.
- The stochastic ones, like MCNP [3], GEANT4 [4] and CEA's TRIPOLI-4[®] [5], are based on Monte Carlo (MC) method. This technique is a microscopic approach that can numerically evaluate arbitrarily complex stochastic processes starting from basic known probability distributions. In the particle transport field, these distributions are based on isotopic data and the stochastic process is the random-walk of single particles, mainly photons when dealing with dismantling applications.

Deterministic PKI-based codes are inherently fast from a computational point of view, as they calculate the dose purely by analytical means, by exponentially attenuating gammas on a straight-line path and integrating over the radiation source volume. This allows the PKI method to be used in real-time dose computation tools like Visiplan [6] and Mercurad [7], and opens the door to virtual reality implementation [8]. However, the speed of the PKI method comes at the cost of accuracy; the analytical dose calculations are based on several assumptions and simplifications which may break down in specific situations, such as scattering-dominated problems, or in the case of very short distance between radiation source and detector [9].

In contrast, MC codes enable a precise estimation of gamma dose rate and can converge to any user-specified level of confidence. However, the determination of local equivalent dose rate needs a very large number of gamma histories to achieve reliable results, which lead to long computation times. For large geometries (*i.e.* reactor-level calculations) the computational burden becomes unfeasible for practical use. Luckily, there exists a large number of options to speed up any MC calculation, in the form of variance reduction techniques (VRTs) [10]. These techniques consist in modifying

the analog random sampling procedure to focus computational efforts on the simulation of important particles, *i.e.* particles that are expected to contribute more to the solution [11].

Alongside VRTs, another way of enhancing the efficiency of a MC simulation is the correct choice of the estimator. It has actually been shown [12] that the appropriate choice of an estimator can dramatically reduce the computation time needed to obtain a sufficiently small confidence interval about the MC estimate. The most basic estimator in MC simulations is the so-called “collision estimator”, which simply estimates the particle flux in a volume by tallying all the interactions taking place inside the volume and weighting them by the inverse of the total macroscopic cross section. This estimator is simple and effective enough to be implemented in virtually every MC code. However, since it is intrinsically related to the number of collisions taking place in the estimation volume, its efficiency drops when it is used in low-density regions or in optically thin regions. In these instances, the collision estimator can produce unreliable estimates with very high variance. Another class of estimators, called track-length estimators (TLEs) can efficiently tackle such problems. TLEs are based on the equivalence between particle fluence and total particle path length per unit volume [13]. The gain in efficiency comes from the fact that, for this class of estimators, every particle trajectory intersecting the estimation volume contributes to the tally; it is easy to see how, for the same number of histories generated, the TLE will always have a number of contributions larger than or equal to the collision estimator. That is why this estimator, in its most simple implementation (called linear TLE or just TLE for short), is nowadays largely used in MC codes [14], and has shown good performance for low-energy applications in medical fields [15] and for reaction rate estimations in the nuclear field [16]. Starting from the classic formulation of the linear TLE, it is possible to derive a more sophisticated estimator called exponential track-length estimator or *e*TLE. The main difference between TLE and *e*TLE is that the latter replaces a stochastic decision, *i.e.* the free flight of the particle, by its expected outcome averaged over the probability distribution of particle flight lengths. Such replacement of a random decision by its expected outcome is a frequently used VRT [17]. In the *e*TLE, after each collision the particle is analytically transported in a straight line up until the simulation boundary, while being exponentially attenuated. It can therefore be viewed as a hybrid transport method, combining stochastic MC and deterministic straight-line transport. Starting from the idea that MC calculations of dose deposition could be accelerated by deterministic transport of photons, a new hybrid approach was developed by Freud *et al.* [18,19]. In this approach, a forced detection [20] algorithm was added to the method, transporting the photons in predefined directions to maximize efficiency. The proposed method, even if just in a very preliminary way, showed good results when compared to the classical MC approach with TLE. In a previous work [21], we described the first implementation of *e*TLE in TRIPOLI-4[®] for dismantling purposes. This first study highlighted the acceleration capabilities of the new estimator, which provided consistent results by reducing computation time by more than a half in the best cases, when compared to the classic TLE. In the same study the *e*TLE was also coupled with two of TRIPOLI-4[®]'s variance reduction techniques, the exponential transform and the advanced multilevel splitting, showing encouraging results. In this paper, we couple the *e*TLE with a forced detection algorithm, drastically improving the efficiency of the estimator in dealing with localized dose deposition calculations. The new estimator is tested on a series of simplified scenarios representative of decommissioning configurations. Its performances are compared with the simpler version of the *e*TLE without forced detection and with the legacy TLE, as implemented in TRIPOLI-4[®].

2 Methodology

2.1 Theoretical basis of *e*TLE

The idea behind the family of TLEs is the following: all the particle flights that intersect the scoring volume (see fig. 1) contribute to the estimate. If we compare this approach to the collision estimator, that only tallies the interactions happening inside the scoring volume, any type of TLE can in principle lower the variance of the simulation, as this last set of events is always smaller than, or equal to, the former. Depending on the implementation, several types of track-length estimators exist; for the purpose of this discussion, we shall concentrate on the estimators for the particle flux.

In the linear formulation of TLE, the contribution of a flight is proportional to the length of the flight segment inside the scoring volume V . This estimator would give a non-zero value after collisions 2, 3 and 4 in fig. 1a, whereas a collision estimator would only register collision 4. More specifically, the contribution given to the linear TLE by a flight from r_1 to r_2 is equal to:

$$K_{\text{TLE}}(r_1, r_2) = w_j \frac{L_V(r_1, r_2)}{V}, \quad (1)$$

where w is the weight of the particle and $L_V(r_1, r_2)$ is the straight-line distance traveled by the particle inside the scoring volume between r_1 and r_2 ; more rigorously, we can write:

$$L_V(r_1, r_2) = \int_0^{|r_2-r_1|} \Pi_V(r_1 + s \cdot \Omega) ds \quad (2)$$

where Ω is the direction of the particle and $\Pi_V(r)$ is the characteristic function of the scoring volume V (which is equal to 1 if the point r is inside the volume and equal to 0 otherwise).

We can derive the e TLE from its linear correspondent by replacing the estimator in Eq. (1) with its average value over all possible flight lengths emerging from collision j . As such, the e TLE estimator is still a flight-based estimator (i.e. it contributes to the score every time a particle performs a flight), but its value does not depend on the end point of the flight r_2 . According to the definition, for the e TLE we can write:

$$K_{e\text{TLE}}(r_1) = \int_0^\infty K_{\text{TLE}}(r_1, r_1 + s \cdot \Omega) \exp\left(-\int_0^s \Sigma_t(r_1 + s' \cdot \Omega) ds'\right) ds, \quad (3)$$

where $\Sigma_t(r)$ is the total macroscopic cross section at position r . If the scoring volume V is uniform ($\Sigma_t(r)$ constant inside the detector) and convex, then the e TLE estimator can be rewritten in the simpler form

$$K_{e\text{TLE}}(r_1) = \frac{w}{\Sigma_t V} \exp(-\rho_V(r_1, \Omega)) [1 - \exp(-\Sigma_t L_V(r_1, \infty))]; \quad (4)$$

here $\rho_V(r_1, \Omega)$ is the optical depth from r_1 to the scoring volume V along direction Ω , and $L_V(r_1, \infty)$ is the length of the chord intersected by V with the flight path:

$$L_V(r_1, \infty) = \int_0^\infty \Pi_V(r_1 + s \cdot \Omega) ds. \quad (5)$$

The efficiency of this method can be illustrated by fig. 1b, where we can see that the particle is not even required to cross the scoring volume to contribute to the score.

An additional improvement can be brought by observing that the e TLE estimator can only contribute to the score if the line of flight intersects the scoring volume. By transforming the e TLE estimator in a collision-based estimator, we can sample virtual collisions directed towards the detection volume and weight them by their probability of occurrence. Fig. 1c shows the additional improvement in efficiency obtained by adding a forced detection (FD) algorithm to the e TLE. Assuming the detection volume is a sphere, we sample a uniformly random direction Ω under the constraint that the half line from the collision point r_1 directed along Ω intersects the sphere. We can write the score for the e TLE with FD as:

$$K_{e\text{TLE,FD}}(r_1, \Omega) = \frac{w}{\Sigma_t V} \exp(-\rho_V(r_1, \Omega)) (1 - \exp(-\Sigma_t L)) \cdot p(r_1, \Omega) \Delta\Omega \quad (6)$$

where $p(r_1, \Omega)$ is the probability density, per unit solid angle, of scattering in the direction Ω after an interaction at r_1 , and $\Delta\Omega$ is the solid angle of the scoring volume seen from the interaction point. If the detection volume is not spherical, the solid angle can be hard to calculate; however, the problem is easily solved by defining a bounding sphere surrounding the volume and then scoring only the particles that effectively cross the volume, as shown in fig. 1c. In this case, the solid angle of the bounding sphere can be easily calculated by knowing the sphere radius and the distance between the interaction point and the center of the sphere.

2.2 e TLE implementation in TRIPOLI-4[®]

We will now describe how the e TLE with FD algorithm is implemented in TRIPOLI-4[®]. The algorithm takes place immediately after the calculation of the random free flight of the particle, when the particle's interaction has not yet been sampled. Since the estimator acts on a "virtual" particle trajectory, the first step consists in creating a fictive particle, which retains the original particle's direction of motion, energy, and simulation weight. The fictive particle immediately undergoes a fictive collision which sends it towards the detector volume, and is then killed after the score. The detailed implementation (see also fig. 2) is as follows:

1. First, the user associates a bounding sphere to each detection volume. The sphere must fully enclose the detection volume while still being as small as possible for maximum efficiency.
2. If the simulation has more than one detector, we start a loop over all of them.
3. We create a "virtual" particle as an exact copy of the original particle.
4. Based on the bounding radius and the distance between the interaction point and the sphere center, we calculate the solid angle subtended by the sphere, $\Delta\Omega$. Then, we sample a random direction uniformly distributed within $\Delta\Omega$.
5. The code samples a "virtual" collision for the fictive particle, adjusting its weight (for implicit capture and for the scattering probability) and assigning the direction determined at the previous step, effectively directing the particle towards the bounding sphere. The energy of the fictive particle is sampled by taking into account the differential cross-section of the collision, according to the direction randomly selected at point 4. This ensures that the physics of the simulation remains unbiased.

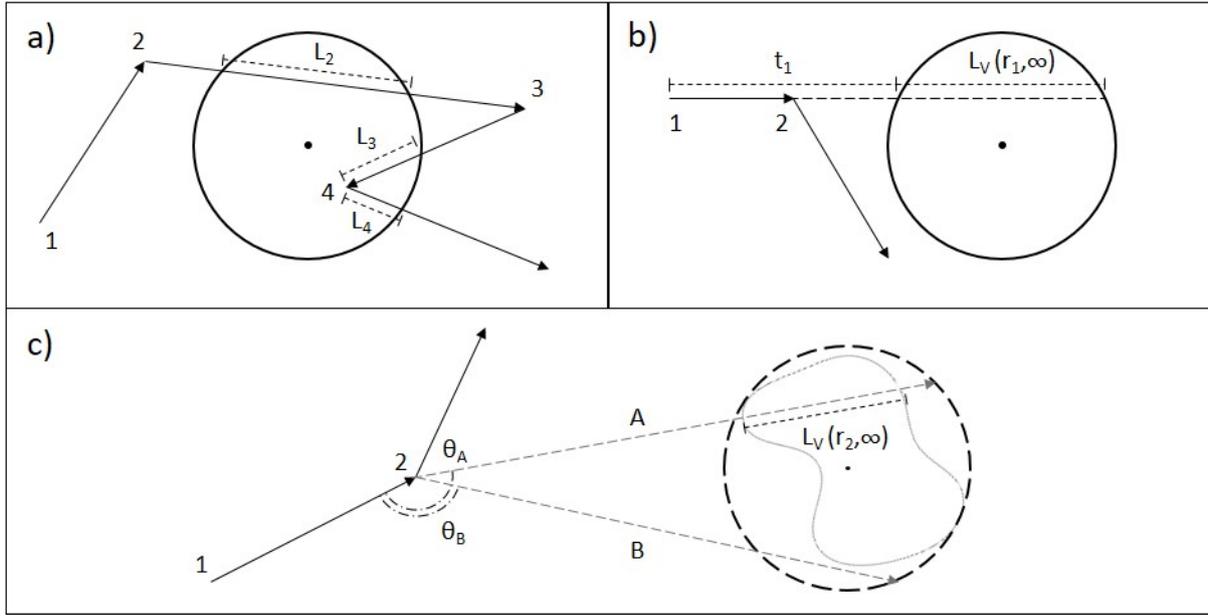


Fig. 1. Visual representation of different track-length estimators: a) linear TLE; b) exponential TLE or e TLE; c) e TLE with forced detection algorithm

6. We calculate the straight-line distance d between the virtual particle and the closest volume frontier.
7. The virtual particle is displaced to its new position on the volume frontier; a value $k_i = w_{i-1}(1 - e^{-\Sigma_t d})/\Sigma_t$ is stored in memory for the volume just crossed. Here, w_{i-1} is the weight of the virtual particle before the i -th displacement and Σ_t is the total macroscopic cross section in the traversed volume. Therefore $w_0(1 - e^{-\Sigma_t d})$ represents the weight loss due to attenuation, and $1/\Sigma_t$ is the expected value of the particle's free flight in the medium.
8. The weight of the particle w_i is updated: $w_i = w_{i-1}e^{-\Sigma_t d}$.
9. We go back to point 6 and repeat the process until the virtual particle reaches a domain boundary.
10. If the particle has crossed the detector volume, we register the score calculated at point 7. Then, we kill the particle and go back to point 2, selecting the next detector in the list.
11. Finally, the virtual particle is deleted and all transport quantities are reinitialized, before going back to the transport of the "real" particle.

2.3 Simulation setup and test cases

This section presents the various geometrical configurations that have been tested to estimate the performance of e TLE. For each configuration, the estimator was tested with and without the forced detection algorithm and compared to the well validated linear TLE of TRIPOLI-4[®]. In all simulations, ^{60}Co is used as a photon source, emitting photons at energies of 1.33 MeV and 1.17 MeV, and the calculated quantity is the equivalent dose rate. A figure of merit (FOM) is defined for each detector volume as:

$$FOM_{det} = \frac{1}{t \sigma_{det}^2} \quad (7)$$

where t is the total simulation time and σ_{det}^2 is the square of the detector's relative error expressed in percent. Geometrical and simulation details for each configuration are given in the following.

2.3.1 Back-scattering configuration

The first configuration reproduces a set of shielding benchmarks originally performed by Odano *et al.* [22]. The back-scattering configuration (fig. 3a) assesses the performance of an estimator concerning the phenomenon of photon back-scattering, or reflection, on concrete. The direct path between the ^{60}Co point-wise source and the detector volumes is shielded by a lead slab of $10 \times 40 \times 5 \text{ cm}^3$. A concrete slab measuring $100 \times 100 \times 20 \text{ cm}^3$ is placed at a

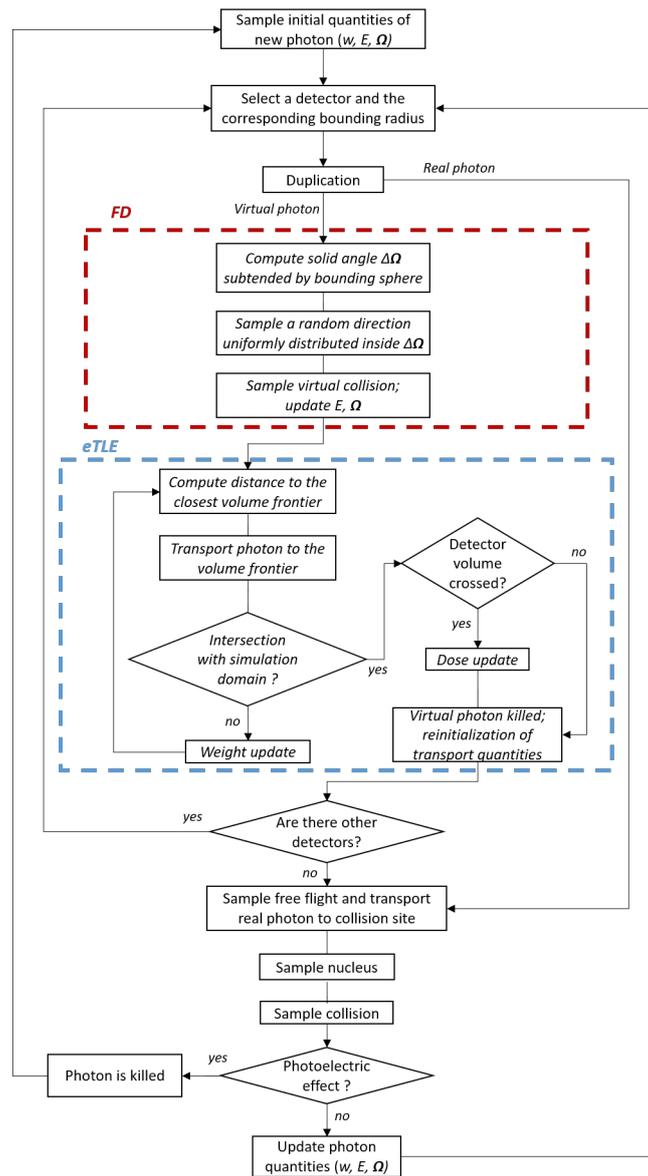


Fig. 2. Flowchart of the *eTLE* algorithm with forced detection; *w* is the particle’s weight, *E* is its energy and Ω is its direction.

distance of 50 cm from the photon source, allowing photons to scatter towards the detectors bypassing the shield. The five detectors are modeled as 1 cm radius spheres spaced 5 cm from each other. The maximum target *sigma* for the simulation is set at 5%.

2.3.2 Slant penetration configuration

The slant penetration configuration (fig. 3b) determines the estimator response to photons traveling inside an attenuating medium with increasing slant angles. The attenuating medium is a $100 \times 200 \times 20 \text{ cm}^3$ concrete slab placed between photon source and detectors at a distance of 1 cm from either side. The first detector is placed vertically above the source; the remaining ten are spaced 10 cm from each other, creating increasing slant angles with respect to the source, up to an angle of about 78° . The detectors are modeled as 1 cm radius spheres. The maximum target *sigma* for the simulation is set at 5%.

2.3.4 Bunker configuration

The bunker configuration (fig. 4b) aims at condensing all the relevant ways of photon transport (scattering, penetration, streaming) in a unified and simple geometrical setup. It represents a typical shielding problem, with a photon source placed in an empty room with scattering concrete walls and a highly-absorbing lead shield partially covering the detector. The bunker's internal dimensions are $1 \times 1 \times 1 \text{ m}^3$, with concrete walls measuring 20 cm in thickness; the detector volume is a 10 cm radius sphere and the lead shield, placed at 50 cm from the source, varies in height and in depth. A total of six configurations were studied, with different shield dimensions as described in table 1. The maximum target σ for the simulations is set at 1%.

Table 1. Shield height (h) and depth (d) variation for bunker configuration

Name	h (cm)	d (cm)
R1	50	10
R2	80	10
R3	100	10
R4	50	20
R5	80	20
R6	100	20

3 Results

3.1 Validation

This step serves to ensure that the new estimator converges to the same results as the classic TLE already implemented in TRIPOLI-4[®], the so-called TRACK estimator. The dose rate computed by e TLE with and without the FD algorithm is compared with the dose rate obtained with the TRACK estimator. Fig. 5 shows the ratio between the two estimates, with tolerance margins of $\pm 2\sigma$ highlighted on the plots. Each point on the plots shows the dose rate of a single detector, with the exception of the streaming duct case, where results for each triplet of detectors occupying the same axial position were averaged to improve legibility. In general, we note a very good accordance with the TRACK results: all results fall inside the error margin, if we consider their relative uncertainty. Both versions of the e TLE, with and without FD, are therefore validated.

3.2 Performance of e TLE

To assess the performance of the new estimator, we compare in fig. 6 the FOM of the simulations with the e TLE to the FOM of the simulations performed with the normal track-length estimator. Therefore, a ratio higher than 1 means that the new exponential estimator performs better than the classic linear one.

In the back-scattering configuration (fig. 6c) the e TLE with FD attains outstanding performances, with acceleration factors up to 2×10^4 . This is an enormous improvement with respect to the normal e TLE, which has acceleration ratios around 1.2 for this configuration.

In the bunker configuration (fig. 6d and 6e), all simulations are accelerated by the e TLE with and without FD. Specifically, with the FD algorithm we reach factors of almost 100, while the normal e TLE had a factor of 2 in the best case.

Results are more varied in the slant penetration (6a) and streaming configurations (6b). In the slant penetration setup, we see that the e TLE without FD is able to uniformly accelerate the results over all the detectors, with acceleration ratios of about 2. With the FD algorithm, the estimator shows increasingly good performances as we move further from the source, with acceleration ratios ranging from lower than 1 (which indicates a drop in performance with respect to the TRACK estimator) to around 10. We can find the same behavior in the streaming configuration, with the estimator failing to accelerate the convergence over the first two detectors and progressively increasing its performances as we move to the farthest detectors, with ratios close to 30. This is also the only configuration where the e TLE without FD fails to accelerate the convergence.

An explanation for this behavior might be found in the fact that having to simulate and transport virtual particles adds a certain amount of overhead to the transport algorithm. To generate a single particle history, the e TLE with FD requires the largest amount of time (which increases with the total number of detectors), followed by the normal

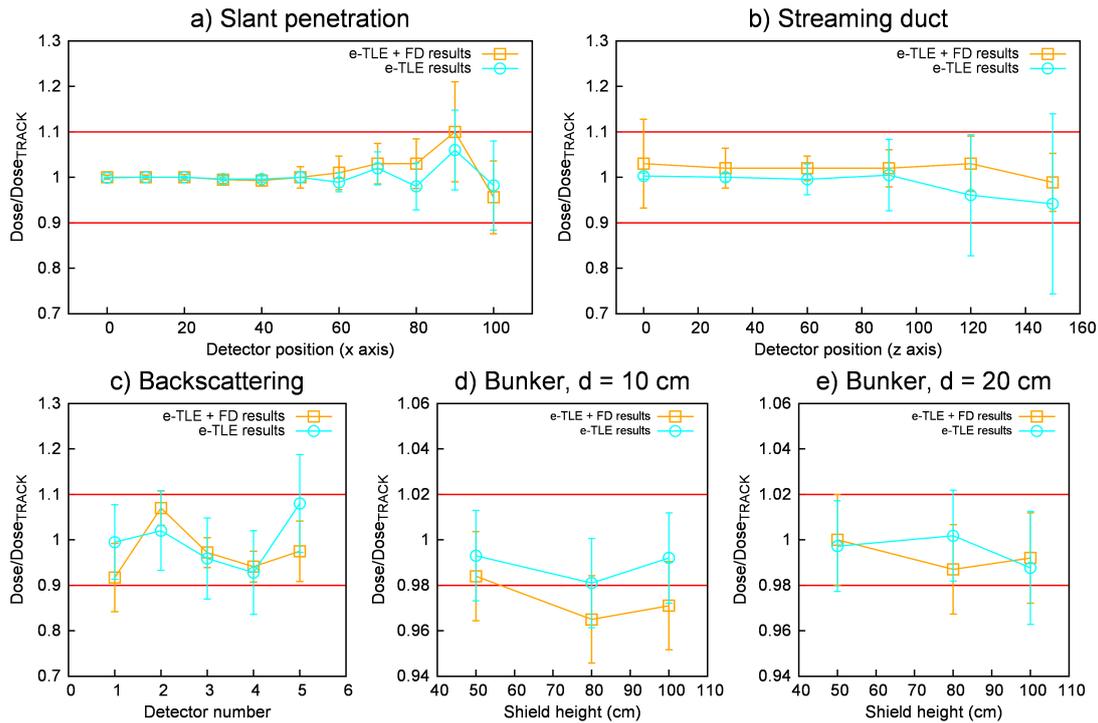


Fig. 5. Validation of the estimator over all tested configurations. The y axis shows the ratio between the equivalent dose rate calculated with the ϵ TLE estimator (with and without forced detection) and the one calculated with TRIPOLI-4[®]'s TRACK estimator

ϵ TLE and then by the classic TRACK estimator. This of course means that, given a certain amount of computation time, the simulation with the TRACK will generate a larger amount of particle histories than the one using the ϵ TLE. Therefore, if a detector is close to the source and easily reached by the particles, convergence with the TRACK estimator will be quicker.

As we mentioned before, in the case of multiple detectors, the current implementation of the FD algorithm sends one virtual particle to each of the detectors before restarting the original particle transport. Intuitively, this implies that the algorithm's efficiency is inversely proportional to the number of detectors in the simulation. Therefore, to try and improve the estimator's performance, we ran an additional set of simulations on both the slant penetration and the streaming duct configurations. In this case, only one detector was active, which means that a total of 22 simulations were run in the slant penetration case (11 with the TRACK estimator, 11 with the ϵ TLE) and 12 simulations were run in the streaming case (6 with the TRACK estimator, 6 with the ϵ TLE). Results of this "single detector" simulations are reported in fig. 7. As we can see from the plots, the estimator performance is drastically improved when used with only one detector, with the efficiency consistently gaining one order of magnitude with respect to the multiple-detector case. We can still see the same behavior related to the detector's distance from the source: for the farthest detectors, we register acceleration ratios of around 500 for the slant penetration case and more than 600 for the streaming duct.

4 Conclusions

This paper provides a closer look at the ϵ TLE recently implemented in TRIPOLI-4[®], with a particular focus on its use with a forced detection algorithm. The new estimator is validated, as it shows good statistical agreement with the results of the classic TRACK estimator of TRIPOLI-4[®]. Moreover, the estimator shows excellent acceleration capabilities when dealing with photon transport in void and scattering-intensive environments, with acceleration factors reaching up to 10^4 . The estimator shows the best performance when used with few detectors, especially if they are sufficiently far from the photon source. These first results are encouraging and open the way to future applications of the new estimator. Studies on the application of ϵ TLE to neutron transport as well as photons are already being conducted, as well as a new mesh-scoring implementation which could significantly expand the estimator's domain of application.

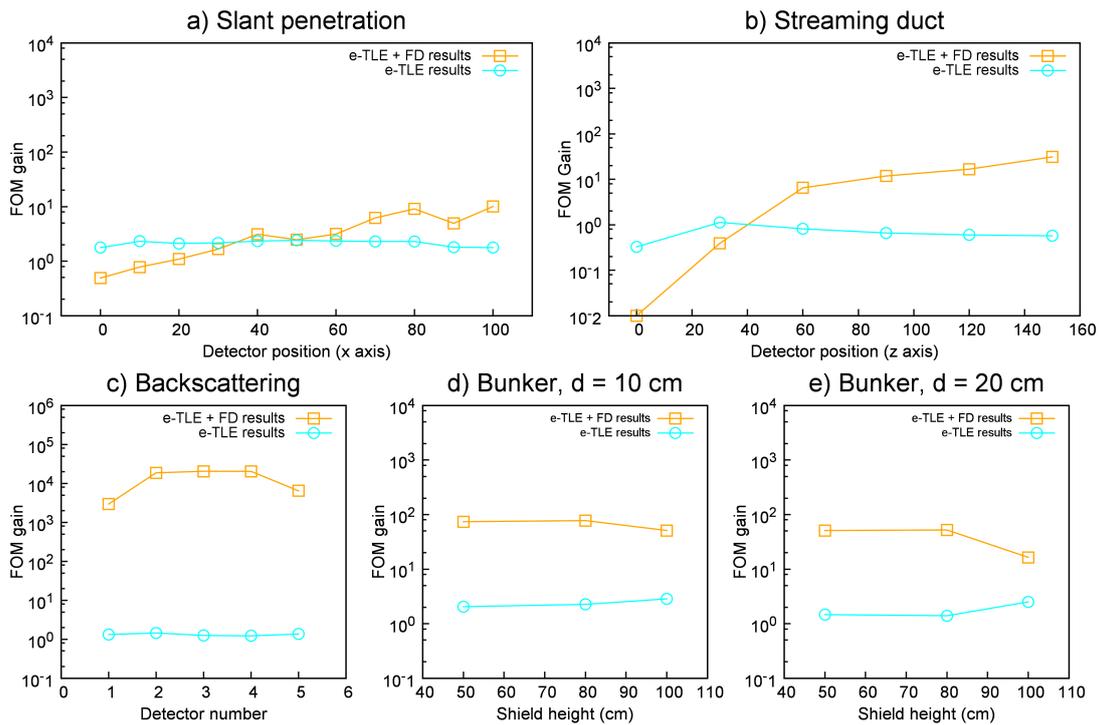


Fig. 6. Performance of the estimator over all tested configurations. The y axis shows the ratio between the figure of merit of the *e*TLE estimator (with and without forced detection) and the figure of merit of TRIPOLI-4[®]'s TRACK estimator

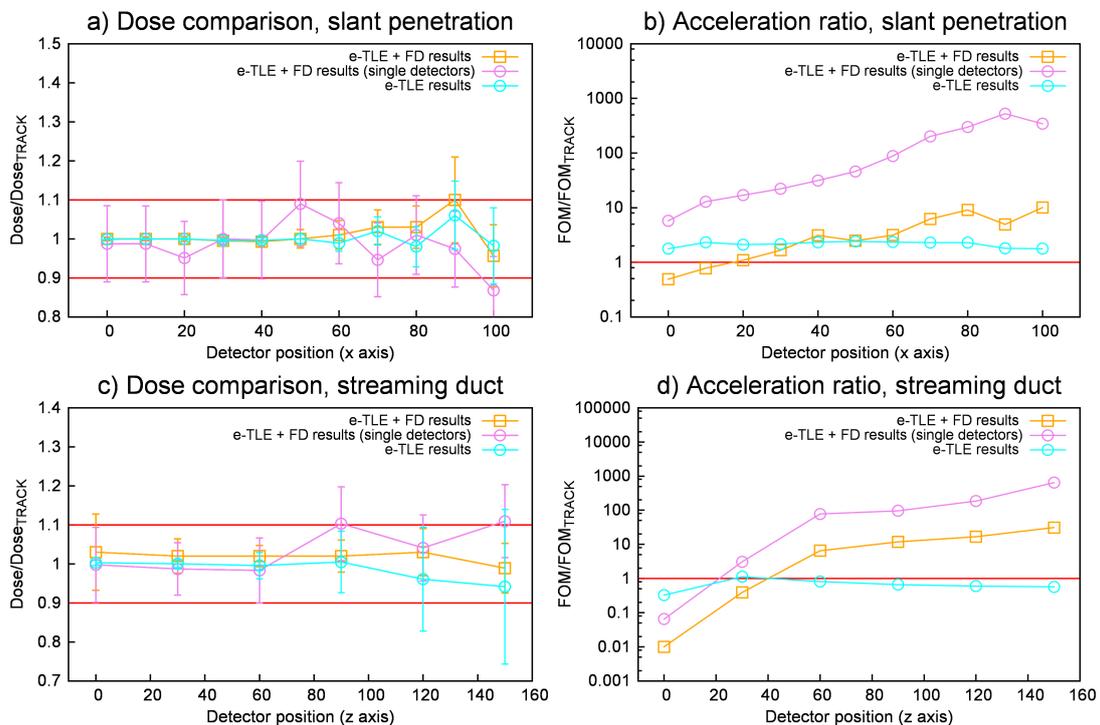


Fig. 7. Validation and performance of the estimator in single-detector simulations.

References

1. P. C. Miller. Rankern - a point kernel integration code for complicated geometry problems. In *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, 1983.

2. T Visonneau, L Pangault, F Malouch, F Malvagi, and F Dolci. NARMER-1: a photon point-kernel code with build-up factors. *EPJ Web of Conferences*, 153:06028, 2017.
3. C. J. Werner. Mcnp users manual - code version 6.2. Technical Report LA-UR-17-29981, Los Alamos National Laboratory, 2017.
4. S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee, G. Barrand, F. Behner, L. Bellagamba, J. Boudreau, L. Broglia, A. Brunengo, H. Burkhardt, S. Chauvie, J. Chuma, R. Chytracsek, G. Cooperman, G. Cosmo, P. Degtyarenko, A. Dell'Acqua, G. Depaola, D. Dietrich, R. Enami, A. Feliciello, C. Ferguson, H. Fesefeldt, G. Folger, F. Foppiano, A. Forti, S. Garelli, S. Giani, R. Giannitrapani, D. Gibin, J. J. Gómez Cadenas, I. González, G. Gracia Abril, G. Greeniaus, W. Greiner, V. Grichine, A. Grossheim, S. Guatelli, P. Gumplinger, R. Hamatsu, K. Hashimoto, H. Hasui, A. Heikkinen, A. Howard, V. Ivanchenko, A. Johnson, F. W. Jones, J. Kallenbach, N. Kanaya, M. Kawabata, Y. Kawabata, M. Kawaguti, S. Kelner, P. Kent, A. Kimura, T. Kodama, R. Kokoulin, M. Kossov, H. Kurashige, E. Lamanna, T. Lampén, V. Lara, V. Lefebvre, F. Lei, M. Liendl, W. Lockman, F. Longo, S. Magni, M. Maire, E. Medernach, K. Minamimoto, P. Mora de Freitas, Y. Morita, K. Murakami, M. Nagamatu, R. Nartallo, P. Nieminen, T. Nishimura, K. Ohtsubo, M. Okamura, S. O'Neale, Y. Oohata, K. Paech, J. Perl, A. Pfeiffer, M. G. Pia, F. Ranjard, A. Rybin, S. Sadilov, E. Di Salvo, G. Santin, T. Sasaki, N. Savvas, Y. Sawada, S. Scherer, S. Sei, V. Sirotenko, D. Smith, N. Starkov, H. Stoecker, J. Sulkimo, M. Takahata, S. Tanaka, E. Tcherniaev, E. Safai Tehrani, M. Tropeano, P. Truscott, H. Uno, L. Urban, P. Urban, M. Verderi, A. Walkden, W. Wander, H. Weber, J. P. Wellisch, T. Wenaus, D. C. Williams, D. Wright, T. Yamada, H. Yoshida, and D. Zschesche. Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3):250–303, July 2003.
5. E. Brun, F. Damian, C. M. Diop, E. Dumonteil, F. X. Hugot, C. Jouanne, Y. K. Lee, F. Malvagi, A. Mazzolo, O. Petit, J. C. Trama, T. Visonneau, and A. Zoia. TRIPOLI-4®, CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code. *Annals of Nuclear Energy*, 82:151–160, August 2015.
6. F Vermeersch and C Van Bosstraeten. Development of the VISIPLAN ALARA planning tool. In *Proceeding of the International Conference on Topical issues in Nuclear Radiation and Radioactive Waste Safety*, page 6, Vienna, Austria, September 1998.
7. Canberra Industries. MERCURAD—Dose Rate Calculation Software, User's Manual. Technical report, DEX-DT-61316, 2003.
8. I. Szöke, M. N. Louka, T. R. Bryntesen, J. Bratteli, S. T. Edvardsen, K. K. Røeitrheim, and K. Bodor. Real-time 3D radiation risk assessment supporting simulation of work in nuclear environments. *Journal of Radiological Protection: Official Journal of the Society for Radiological Protection*, 34(2):389–416, June 2014.
9. M Longeot, B Dupont, M Zweers, F Malvagi, J-C Trama, and J Dubost. PANTHERE: simulation software for 3D dose rate calculation in complex nuclear facilities. *Progress in Nuclear Science and Technology*, 4:557–560, 2014.
10. G. Gualdrini and P. Ferrari. Monte Carlo variance reduction techniques: an overview with some practical examples. *Radiation Protection Dosimetry*, 146(4):425–433, July 2011.
11. A Haghghat and J C Wagner. Monte Carlo variance reduction with deterministic importance functions. *Progress in Nuclear Energy*, 42(1):25–53, January 2003.
12. J F Williamson. Monte Carlo evaluation of kerma at a point for photon transport problems: Monte Carlo calculation of kerma at a point. *Medical Physics*, 14(4):567–576, July 1987.
13. G A Carlsson. *The dosimetry of ionizing radiation*, volume 1, chapter Theoretical Basis for Dosimetry. Academic Pr, 1986.
14. F. Baldacci, A. Mittone, A. Bravin, P. Coan, F. Delaire, C. Ferrero, S. Gasilov, J.M. Létang, D. Sarrut, F. Smekens, and N. Freud. A track length estimator method for dose calculations in low-energy X-ray irradiations: implementation, properties and performance. *Zeitschrift für Medizinische Physik*, 25(1):36–47, March 2015.
15. A Mittone, F Baldacci, A Bravin, E Brun, F Delaire, C Ferrero, S Gasilov, N Freud, J M Létang, D Sarrut, F Smekens, and P Coan. An efficient numerical tool for dose deposition prediction applied to synchrotron medical imaging and radiation therapy. *Journal of Synchrotron Radiation*, 20(5):785–792, September 2013.
16. T Viitanen and J Leppänen. Validating the serpent model of FiR 1 Triga Mk-II reactor by means of reactor dosimetry. *EPJ Web of Conferences*, 106:03010, 2016.
17. E J McGrath and D C Irving. *Techniques for efficient Monte Carlo simulation*, volume III. Variance reduction. Science Applications, Incorporated, 4 1975.
18. N. Freud, J.-M. Létang, and D. Babot. A hybrid approach to simulate multiple photon scattering in X-ray imaging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 227(4):551–558, January 2005.
19. N Freud, J M Letang, C Mary, C Boudou, C Ferrero, H Elleaume, A Bravin, F Esteve, and D Babot. A Hybrid Approach for Fast Simulation of Dose Deposition in Stereotactic Synchrotron Radiotherapy. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 55(3):1008–1017, June 2008.
20. D R Haynor, R L Harrison, and T K Lewellen. The use of importance sampling techniques to improve the efficiency of photon tracking in emission tomography simulations. *Medical Physics*, 18(5):990–1001, sep 1991.
21. E Guadagni, Y Pénéliou, J M Létang, F-X Hugot, and C Le Loirec. A hybrid deterministic-stochastic method for the calculation of dose rate in reactor dismantling operations. In *ANS M&C 2021 - The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (Raleigh, North Carolina)*, 2021.
22. N Odano, T Miura, and Y Shindo. Experimental Assessment of Gamma-Ray Shielding Transport Calculations by Monte Carlo Calculation Code and Point-Kernel Code. In *Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding*, volume 1, pages 1301–1308, Arlington, Texas, April 1994.

PARTIE IV

CARACTÉRISATION DU TERME SOURCE DANS LES ACTIVITÉS DE A&D

La vie d'une installation nucléaire peut être résumée en trois phases : (i) conception et construction ; (ii) exploitation ; (iii) démantèlement. Le démantèlement comprend un ensemble d'opérations, réalisées parfois pendant plusieurs décennies, visant à assainir puis déconstruire une installation en vue d'obtenir son déclassement. Le démantèlement est donc un processus complexe impliquant la décontamination, le démontage et la démolition d'équipements et de structures ainsi que la gestion des déchets associés. Une stratégie de démantèlement doit prendre en compte également des aspects sanitaires et sécuritaires pour le personnel impliqué dans le processus mais également pour la population et l'environnement, le but ultime étant la libération sans restriction ou la réutilisation du site.

Les opérations de déconstruction sont soumises à une procédure équivalente à celles mises en oeuvre pour la création d'une installation nucléaire : établissement d'un dossier dans lequel est décrit le processus pour déconstruire, les précautions à prendre pour protéger les travailleurs, l'environnement et la population. Ces opérations doivent désormais être anticipées dès le départ afin de concevoir l'installation de manière à la déconstruire le plus facilement possible.

Le démantèlement constitue donc un véritable enjeu pour la filière nucléaire. Il contribue à l'acceptabilité de celle-ci en démontrant la capacité à maîtriser tout le cycle de vie d'une installation nucléaire dès sa conception. Les projets de démantèlement et de reprise des déchets doivent répondre aux forts enjeux liés à la maîtrise des coûts et des délais tout en s'intégrant dans le respect des exigences réglementaires, de sûreté et environnementales.

Des chantiers de démantèlement ont aujourd'hui abouti, montrant par là qu'on progresse dans la maîtrise technologique des opérations. Il apparaît néanmoins que chaque projet constitue un prototype complexe et l'hétérogénéité des opérations menées jusqu'à maintenant ne permet pas que des standards d'outils ou d'approches puissent s'imposer réellement pour l'heure. Un point commun entre les différents chantiers de démantèlement menés jusqu'aujourd'hui est la caractérisation de l'état initial de l'installation concernée. L'assainissement et le démantèlement des installations nucléaires contaminées débutent en effet par la démonstration de la maîtrise du terme source. L'inventaire radiologique est aujourd'hui assuré essentiellement à partir de l'analyse des documents techniques de l'installation puis confirmé par des opérations de caractérisation radiologique. Cette méthode est adaptée à la mise en évidence de points de concentration d'activité, lesquels sont importants pour définir les procédés de dépose et de retrait des composants. Pour accompagner les enjeux industriels associés à cette activité, il apparaît donc de plus en plus important de pouvoir produire un calcul de terme source prévisionnel (bilan matière, activité, émission neutronique, sources, débit de dose, etc...) *via* un formulaire dédié. Un calcul prévisionnel du terme source permettrait, en fonction de l'incertitude associée, soit la mise en surveillance de l'installation (calcul "enveloppe") soit la caractérisation et le cycle de vie d'un objet tel qu'un colis de déchet (calcul "best-estimate").

Une des missions principales du SPRC est de fournir au CEA et à ses partenaires industriels, des formulaires de calcul pour les diverses filières de réacteurs. Ces formulaires industriels sont dédiés à une application spécifique et permettent d'évaluer avec une précision donnée, pour une filière nucléaire et son cycle associé, les paramètres neutroniques nécessaires à la conception, au fonctionnement et à la sûreté des réacteurs ainsi qu'à celle des autres étapes du cycle nucléaire. Les activités d'assainissement-démantèlement sont amenées à croître dans les années à venir. A ce jour, aucun formulaire dédié à ces activités n'est disponible.

Dans le cas du démantèlement d'un réacteur, le formulaire DEMAINE (DEMAntèlement des Installations Nucléaires) est actuellement en développement et mis en oeuvre au SPRC pour le déman-

tèlement d'INBs se trouvant sur le site de Cadarache.

Le formulaire DEMAIN doit permettre de caractériser (spectre énergétique, répartition dans l'espace) toutes les sources de particules (neutron, alpha, beta, gamma) et d'en évaluer la propagation (sur des distances parfois assez grandes) ainsi que leurs effets sur l'environnement (dommages, débits de dose) dans le cadre d'installations en phase de démantèlement. Il doit aussi permettre d'évaluer au mieux la quantité des produits d'activation créés par les réactions nucléaires successives sur les constituants de l'acier de la cuve et de ses internes.

Un produit d'activation i est formé en un point \vec{R} d'une structure à la suite de réactions successives sur des nucléides pères nommés J et K . Il s'agit donc de calculer à chaque instant t le bilan des formations et disparitions sous la forme :

$$\frac{dN_i(t, \vec{R})}{dt} = \left[\sum_j N_j(t, \vec{R}) \sigma_{j \rightarrow i}(E) - N_i(t, \vec{R}) \sigma_i(E) \right] + \sum_k N_k(t, \vec{R}) \lambda_{k \rightarrow i} - N_i(t, \vec{R}) \lambda_i \quad (9.0.3)$$

Pour résoudre ces équations, il faut connaître le flux de neutrons au niveau des structures. En dehors des périodes de fonctionnement le flux est nul et le système se réduit donc à un système d'équations différentielles du premier ordre. Pour les périodes de fonctionnement, la résolution du système d'équations est plus complexe. Il faut donc poser plusieurs approximations concernant le flux de neutrons. On procède alors à une séparation des variables temps, espace et énergie en écrivant :

$$\Phi(E, t, \vec{R}) = \Psi(t) \cdot \phi(E, \vec{R}) \quad \phi(E, \vec{R}) = \int_{\text{historique_du_reacteur}} \Phi(E, t, \vec{R}) dt \quad (9.0.4)$$

On considère ainsi en tout point de l'espace et pour tout groupe en énergie un flux moyenné sur toute la vie du réacteur pour calculer le taux d'activation moyen par seconde du nucléide considéré. Cette hypothèse suppose que l'on ait une connaissance suffisamment précise de l'historique du réacteur. La variable temporelle peut alors être prise en compte *a posteriori*.

Au regard de ces hypothèses, le formulaire DEMAIN se décompose donc de la façon suivante :

- Etape 1 : génération des sources de fission

Il s'agit de calculer la répartition géométrique des sources de fission moyennée temporellement sur toute la vie du réacteur en chaque point d'espace. Il est donc nécessaire d'avoir une connaissance précise de l'historique de fonctionnement et en particulier de la position moyenne des croix de contrôle. Il n'est pas indispensable de décrire finement la composition isotopique du combustible car ce sont les neutrons rapides de fission que l'on propage et l'influence de ces matériaux est faible. De plus, l'activation des structures étant principalement due aux neutrons de fuites issus du cœur, son évaluation impose une description géométrique la plus précise possible, notamment des chemins supposés de fuite et une description fine de la répartition des taux de production neutronique en périphérie du cœur.

- Etape 2 : propagation des sources de fission et détermination du flux dans les structures d'intérêt

On fait ici l'hypothèse que les neutrons source ont un profil énergétique de type spectre de fission.

- Etape 3 : activation des structures

- Etape 4 : détermination des débits de dose aux points d'intérêt

La mise en place d'un formulaire suit le processus de VVQI qui permet d'estimer les biais et incertitudes associés au formulaire :

- la tâche de *vérification* permet de s'assurer que le schéma de calcul ne contient aucune erreur de programmation et fournit les résultats numériques attendus ;
- la tâche de *validation* permet de déterminer le degré d'adéquation entre l'outil de calcul et la monde réel soit de quantifier le biais qui peut avoir deux origines : **(i) les modèles**, soit les approximations faites dans les schémas de calcul au niveau de la géométrie, de l'autoprotection, de l'évolution du combustible, du solveur de flux ; **(ii) les données nucléaires** ;
- la tâche de *quantification des incertitudes* permet de déterminer un facteur d'échelle entre les expériences intégrales et le modèle ; elle permet également de propager les incertitudes technologiques sur les paramètres neutroniques et photoniques calculés par le schéma de calcul.

Les deux chapitres de cette partie sont dédiés à la validation et à la qualification du formulaire DEMAIN : le chapitre 1 se focalise sur la comparaison des résultats du formulaire avec les données d'un benchmark alors que le chapitre 2 est consacré à l'impact des données d'entrée et à l'influence de biais de modélisation sur les estimations issues du formulaire.

Chapitre 10

Benchmark du formulaire DEMAIN

Le formulaire DEMAIN (DEMantèlement et Assainissement des Installations Nucléaires) s'inscrit dans la démarche de l'ASN de l'arrêté INB 2012 sur les outils de calcul scientifique. Il permet de réaliser la caractérisation préliminaire (avant démantèlement) des structures et/ou des combustibles d'une Installation Nucléaire de Base (terme source : isotopie, activité, sources, puissance résiduelle...).

Pour cela, de nombreuses données d'entrée issues de l'installation sont nécessaires :

- une connaissance fine des géométries, des compositions (dont impuretés), et des historiques d'irradiation ; dans le cas où ces données ne sont pas disponibles, les hypothèses les plus majorantes en terme d'activation sont prises en compte et une étude d'impact est réalisée à l'aide d'incertitudes technologiques ;
- un modèle 3D complet pour la précision des résultats et la quantification des incertitudes ;
- des mesures *in situ* et des analyses d'échantillons (écarts calculs/mesures, sensibilité à la composition initiale, incertitudes).

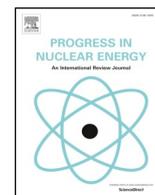
Le formulaire permet *in fine* d'obtenir :

- une classification des déchets adaptée en fonction de leur activité ;
- la définition du ou des scénarios de démantèlement optimum (phasage des opérations, volume des déchets, dose reçue).

afin de réaliser le démantèlement (et les transports associés) au coût et à terminaison le plus raisonnable possible avec une dosimétrie la plus faible possible.

Des codes de calcul et des données nucléaires appropriés doivent donc être utilisés pour obtenir une prédiction fiable de l'inventaire isotopique. Ces procédures informatiques souffrent d'incertitudes au niveau des données d'entrée, de la discrétisation du domaine et de l'application de certains modèles ; la confiance dans la valeur calculée de toute densité de nucléides ne peut être considérée comme complète si elle n'est pas accompagnée de son incertitude correspondante.

Dans l'article présenté dans ce chapitre, les flux et activités obtenus avec le formulaire DEMAIN sont comparés minutieusement avec les données expérimentales de référence issues du benchmark JPDR et complétés par la propagation des incertitudes dues aux données nucléaires et au calcul stochastique du flux neutronique.



Benchmark of DEMAİN, a new calculation package for decommissioning purposes

C. Le Loirec*, M. Soulard, G. Ritter, Y. Pénéliou

CEA, DEN, Cadarache, DER, SPRC, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France



ARTICLE INFO

Keywords:

Activation analysis
TRIPOLI-4®
DARWIN
Uncertainty propagation

ABSTRACT

This paper presents a verification benchmark of the TRIPOLI-4®DARWIN-PEPIN2 coupling for performing radiological characterization of reactors in decommissioning phase. Computed activities were compared with measured activities included in the JPDR experimental program. A good agreement was found with a variability of about $\pm 30\%$. In this study we also focused our work on the stochastic and ND uncertainty propagation which is often neglected in the inventory calculation dedicated to decommissioning. Activation cross section uncertainties contribute highly to the global uncertainty. The current benchmark exercise successfully validates the general computational procedure and gives access to a quantification of the activation uncertainties.

1. Introduction

Decommissioning of nuclear facilities is nowadays one of the most important issues in the field of nuclear technology: it has not only techno-economic implications but also social and environmental impacts (Invernizzi et al., 2017). The process of Decommissioning and Dismantling (D&D) allows the iterative determination of the current radioactivity inventory (quantities, types and distribution of the radionuclides in terms of residual activation levels and contamination levels) in accordance with the ALARA (As Low As Reasonable Acceptable) principles.

Radiological characterization is thus essential in planning of a decommissioning project as it ensures the decommissioning activities to be conducted in safe and rational manners by minimizing extra costs (NEA, Report, 2013; Park et al., 2016), radiological doses, project delay and environmental impacts (IAEA (b); IAEA (a)). It is often performed prior to dismantling by combining numerical and experimental methods to assess the major radiological consequences of decommissioning a reactor: waste disposal and radiation exposure to occupational exposed personnel during dismantling operations. Appropriate computational codes and nuclear data should be used to obtain a reliable isotopic inventory prediction. Since the 90s, different calculation systems have been developed coupling a neutron transport code with an isotopic inventory code: MCNP (Werner, 2017) and ORIGEN (NEA Data Bank Computer Program, 2002), MCNP and FISPACT (Forrest and Sublet, 2001), MCNP and ACAB (Sanz, 2000). TRIPOLI-4® (Brun et al., 2015) is a Monte Carlo (MC) code developed at CEA. It has already been

combined with the DARWIN-PEPIN code system (Tsilanizara et al., 2000) which integrates all the phenomena leading to radionuclide production to assess radionuclide inventory of irradiated graphite (Nicaise and Poncet, 2016). The present article deals with the use of the TRIPOLI-4® MC code (v4.10) associated with the DARWIN-PEPIN2 (v2.3) depletion package in a new code system dedicated to decommissioning applications and called DEMAİN (Dismantling and Decommissioning of Nuclear Facilities, “Démantèlement et Assainissement des Installations Nucléaires” in French).

However, before using software for specific applications, one should try to repeat some benchmarks and analyze their results. A benchmark problem is based on a reference design from a real reactor and is defined with a complete set of input data. The most fruitful benchmarks are the ones that describe a succession of several calculation stages with reliable experimental data. In the JPDR (Japan Power Demonstration Reactor) benchmark (Sukegawa et al., 1993); Kocherov (1996); Sukegawa et al. (2000) radial and axial activity profiles at various locations in the excore structure and bioshield regions are available for several important radioactive isotopes. Moreover, a complete succession of calculation stages is traced carefully: modeling, transport calculation, fluence and reaction rates estimation, operating history analysis, activation evaluation and dose rates calculation. The JPDR has indeed been characterized from physical and radiological point of view by techniques developed at the Japan Atomic Energy Research Institute to plan the dismantling activities. During the dismantling activities, data on radioactivity were collected to verify the predicted results. Predicted and collected data were then compiled as a benchmark

* Corresponding author.

E-mail address: Cindy.LELOIREC@cea.fr (C. Le Loirec).

problem by the advisory group of International Atomic Energy Agency to conduct a study on nuclear data for fission reactor decommissioning. The JPDR benchmark is used here to validate DEMAIN computational procedure.

Moreover, such computational procedures suffer from uncertainties in input data, discretization of the domain and approximation in some models (Rossini et al., 2018), and the confidence in the calculated value of any nuclide density cannot be deemed complete if it does not come along with its corresponding uncertainty. Uncertainty and bias originate from errors in physical data, manufacturing uncertainties and modeling and computational algorithms (Avramova and Ivanov, 2010). This information can be obtained via the propagation of parameter uncertainties in calculations of the considered quantity. Woollam and Pugh (1978) have identified a number of areas where uncertainties and biases could be significant for dismantling activities:

- in the neutron transport calculations:
 - errors in the assumed power distribution and overall power history,
 - errors in the geometrical representation of the reactor,
 - uncertainties due to inadequate statistics in the MC calculations,
 - uncertainties in the nuclear data (ND) for the transport calculation.
- in the activation calculations apart from those due to the neutron fluence rates:
 - uncertainties in the assumed material compositions, especially impurity concentrations,
 - uncertainties in the ND related to the activations.

These uncertainties should be considered when assessing the radiological consequences of the inventory in regard both for disposal and dismantling. ND uncertainties are stored in ND libraries (ENDF/B VII.1 (Chadwick et al., 2011) and JEFF 3.1.1 (Santamarina et al., 2009)) as standard deviations or full covariance matrices. Sensitivity analysis and uncertainty quantification studies for material depletion are generally investigated with methods based on the first order perturbation theory (Cacuci, 2003); Williams and Weisbin (1978) which were incorporated in dedicated codes like TSUNAMI (Rearden and Mueller, 2011) and more recently IncerD (Lahaye et al., 2016) at CEA. Such calculations are usually performed for actinide inventory (Garcia-Herranz et al., 2008); Fiorito et al. (2015); Kuijper et al. (2005) but few studies deal with the propagation of ND uncertainties for radionuclides of interest for dismantling.

In this paper calculated fluence rates and activities obtained with DEMAIN computational procedure are compared properly with experimental data from JPDR benchmark and completed with the propagation of ND and stochastic uncertainties related to dismantling activities. Given the high number of parameters influencing the measurements (detector position, analysis, sensitivity,...) and the simulation (material composition, reactor history, ...) 30% differences between measured and simulated results are considered as a good approximation and are chosen as a success criterion.

2. Materials and methods

The JPDR was a boiling water type nuclear power plant of 90 MWt. The criticality was attained in August 1963 and the plant operated intermittently until March 1976 with a total thermal output of 21 500 MWD. The decommissioning program started in 1986 and was completed by March 1996 (Yanagihara et al., 1994).

2.1. Code system for inventory calculation

DEMAIN is a code system developed by the CEA. It is devoted to the radiological characterization of reactors in decommissioning phase. It is composed of 4 main steps reported in Fig. 1 (i) Core calculation, (ii)

Neutron transport, (iii) Activity inventory calculation, (iv) Gamma transport) but only steps 2 and 3 are switch on for this benchmark.

MC based neutron transport calculations are performed with TRIPOLI-4[®] (v4.10) (Brun et al., 2015) and CEAV5.1.2 data library based on JEFF 3.1.1 (Santamarina et al., 2009) in order to determine the neutron fluence rates in different material regions: shroud, reactor vessel, cladding, biological shielding. The neutron fluence rates are calculated at the nominal power rating conditions and each fluence rate is homogenized in a limited number of energy groups (TRIPOLI-4[®] 315 groups). The neutron fluence rates are then used to model the activation processes of different nuclides with DARWIN package (Tsilanizara et al., 2000). The nuclear data library used for activation is EAF-2001 (Forrest, 2001). The irradiation history is modeled according to the data reported in Sukegawa et al. (1993) and Kocherov (1996).

2.1.1. Monte Carlo model

The JPDR configuration is modeled in R-Z cylindrical geometry of 12 m in height and 7 m in diameter according to data reported in Sukegawa et al. (1993) and Kocherov (1996). The reactor core is modeled by a cylinder with equivalent diameter and the outer layers are modeled so that their radial widths are preserved. Figs. 2 and 3 show the MC model at core midplane level and in the axial direction, respectively. Materials of the core are homogenized and the core is axially divided into three zones taking into account the axial void distribution within the core, while the radial distribution is assumed to be uniform (Sukegawa et al., 1993). Material compositions are the one indicated in Sukegawa et al. (1993) and Kocherov (1996). The impurities are not taken into account in this calculation step.

In Kocherov, 1996 several fission spectra were tested to study the impact of uranium and plutonium fission spectrum on structures activation. Results confirmed that there was little differences between the different sets of results. Indeed the main differences between fission spectra are due to the shape of the distribution tail and thus to the contribution of fast neutrons. As activation reactions are mainly due to (n,γ) reactions the choice of fission spectrum has no consequence on our results. According to this remark and to previous results, source condition and configuration have been modeled in such a way that it has been done in papers (Sukegawa et al., 1993); Kocherov (1996). The fission neutron spectrum is assumed to be accurately expressed by the Watt's formula. The number of neutrons emitted per fission was assumed to have a typical value of 2.47 for a thermal reactor. The total source is normalized such that 90 MWth of thermal power is generated within the core corresponding to $6.92 \times 10^{18} n/s$. The energy per fission used for normalization is 200 MeV. The power distribution is assumed to be factorized about radial and axial variables as reported in Sukegawa et al. (1993) and Kocherov (1996). Three MC calculations are performed:

- “REF” calculation is a reference calculation which allows a validation of the fluence rate behavior from the core to the biological shielding for the core mid-plane. An analog TRIPOLI-4[®] simulation is performed by using continuous energy cross-sections (CEAV5.1.2 data library). The flux is estimated on an extended mesh with the following bins:
 - 158 variable bins for the radial variable,
 - 1 bin for the angular variable,
 - 90 variable bins for the axial variable.

The collision (COLL) and track length (TRACK) estimators are used to calculate the flux with 315 energy groups. Only the results obtained with the TRACK estimator are reported here because it gives access to smoother results, especially in the air gap. The flux is then condensed in three groups and compared to data reported in Kocherov (1996).

- “VRT” simulation is used to estimate the fluence rates in the materials of interest; to speed up the calculation a variance reduction

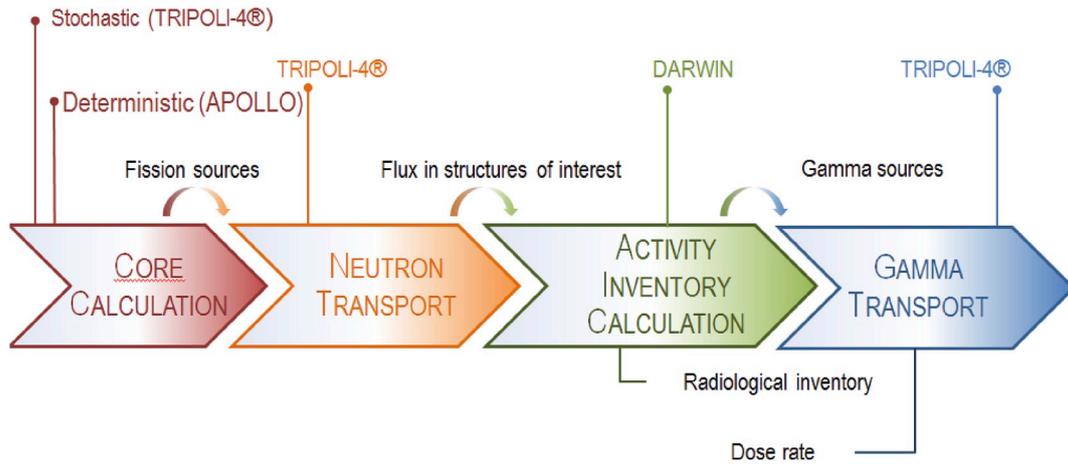


Fig. 1. DEMAIN code system.

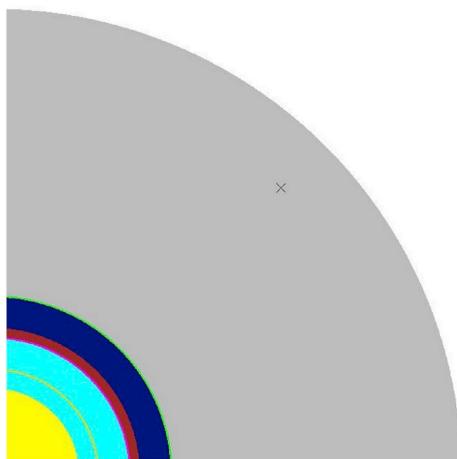


Fig. 2. TRIPOLI-4® JPDR model at core midplane level. From the second fuel region (in yellow) to the bioshield (in grey) the following materials are met: water in cyan, the shroud in gold, water in cyan, the very thin cladding in magenta, the vessel in dark red, air in navy and steel in green. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the Web version of this article.)

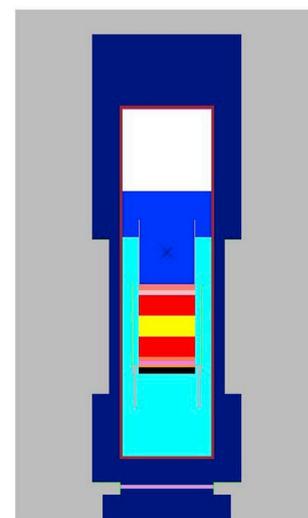


Fig. 3. TRIPOLI-4® JPDR model (R-Z view). The fuel regions are represented in yellow and red. Water and steam levels are in cyan, blue and white, respectively. Up plenum and up grid are in pink and salmon, respectively. Low plenum, low base, low plate and low grid are in coral, violet, orange and black, respectively. Other elements are detailed in Fig. 2. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the Web version of this article.)

adjustment is performed. The INIPOND module of TRIPOLI-4® (Petit et al., 2014) is used to generate an importance map for the following radius: 201.50 cm. To validate the generation and the use of the importance map, a first simulation is performed with the importance map and compared with a simulation without any importance map. The fluxes estimated at four points are compared as well as the efficiency of the simulation defined as:

$$\epsilon = \frac{1}{\sigma^2 t} \tag{1}$$

with σ the statistical standard deviation produced by TRIPOLI-4® and t the computation time.

- “REF-2” calculation is used to validate the variance reduction adjustment and to estimate its relative efficiency; to ease the comparison the calculation is performed with the same cpu time.

The simulation is then performed with the importance map. The fluxes are obtained in the volumes reported in Fig. 4:

- 600 cm³ volumes in the bioshield (numbered 1000 to 1010) located at the core mid-plane for 11 different radii,

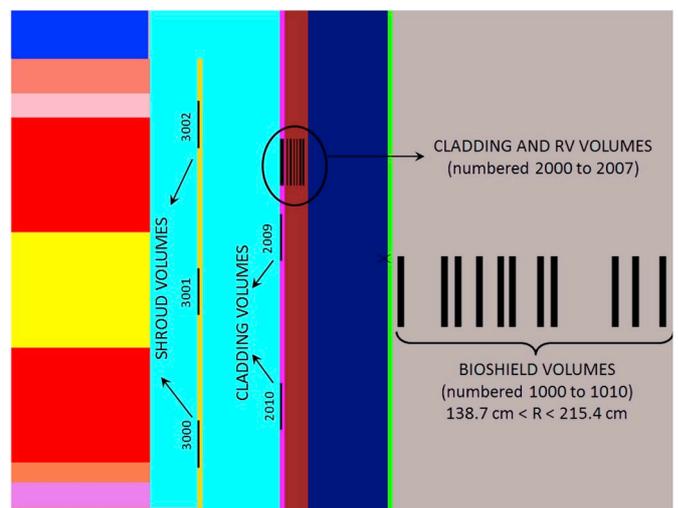


Fig. 4. Detection volumes for activity calculation.

- 5 cm³ volumes in the reactor vessel and the cladding (numbered 2000 to 2010) located at different axial positions and radii,
- 5 cm³ volumes in the shroud (numbered 3000 to 3001) located at different axial positions.

These data are then used to prepare an input deck for the DARWIN-PEPIN2 code by using the PEPIN module of TRIPOLI-4[®]. The impurities of the materials are added manually for each composition according to data reported in Sukegawa et al. (1993).

2.1.2. Activity calculation

The neutron fluence rates obtained in the structures of interest (bioshield, reactor vessel, cladding and shroud) are then used to model the activation processes of different nuclides with DARWIN-PEPIN2 package (v2.4) (Tsilanizara et al., 2000). The INTERPEP interface program uses the neutron fluence rates obtained by TRIPOLI-4[®] to condense the multigroup cross-sections. Then PEPIN2 solves the generalized Bateman equations which govern the time dependence of isotope concentrations. The calculations are based on original data (Sukegawa et al., 1993; Kocherov, 1996) and compared with measured activity reported in Sukegawa et al. (1993) and Kocherov (1996) for ¹³⁴Cs, ⁶⁰Co, ¹⁵²Eu, ¹⁵⁴Eu, ⁵⁴Mn, ⁵⁵Fe and ⁶³Ni. All experimental data are reduced to common data on March 31, 1991 (Sukegawa et al., 1993; Kocherov, 1996), thus fifteen years following the end of the operation. Operating history is interpreted in simplified form with constant power during each of ten operating cycles.

2.2. Uncertainty estimation

Assuming no uncertainties in the initial nuclide densities, uncertainties can be found in all the parameters involved in the evolution of the material composition due to neutron irradiation. The uncertainty due to physics stems from two sources:

- the uncertainty $\sigma_{(fluence, DN)}$ in the neutron fluence rate due to uncertainties in the ND in the materials involved in the calculations: it is depending on the different reactions encountered by the neutrons. In this estimation there can also be a contribution due to statistic, as neutron fluence rate is stochastically obtained by MC methods. Consequently, the variance due to statistics $\sigma_{(flux, stoch)}$ needs to be estimated separately in order to obtain the variance in ND. This stochastic uncertainty $\sigma_{(flux, stoch)}$ should also be propagated to the final activity value.
- the uncertainty $\sigma_{(act, DN)}$ in activity due to uncertainties in the activation processes. Indeed determination of activity levels depend on ND such as decay constant λ , branching ratio br and effective cross-section (of the activation reaction to the local neutron flux). These data are obtained by measurements and some physical-mathematical formalism. Some uncertainties are associated to these values and they can be propagated to the final activity value with the latest version of IncerD (Lahaye et al., 2016) by using the sensitivity coefficients obtained for the isotopic concentration (IC).

2.2.1. Propagation of the stochastic uncertainty

Considering on one hand the influence of the statistical fluctuation of the flux spectrum is not obvious because no correlation between energy groups is known but, on the other hand, there are no identified reasons to think that different energy group fluxes are not strongly correlated. An analysis performed by Garcia-Herranz et al. (2008) shows that for each energy group the flux spectrum fits a normal distribution where the standard deviation of the normal is the flux statistical error directly taken from a single MC calculation. Moreover no correlation between energy groups is seen.

According to this analysis, the stochastic uncertainties $\sigma_{(flux, stoch)}$ on MC fluxes were propagated on the multi-group flux spectrum in order to determine the impact of stochastic uncertainty on structure activation

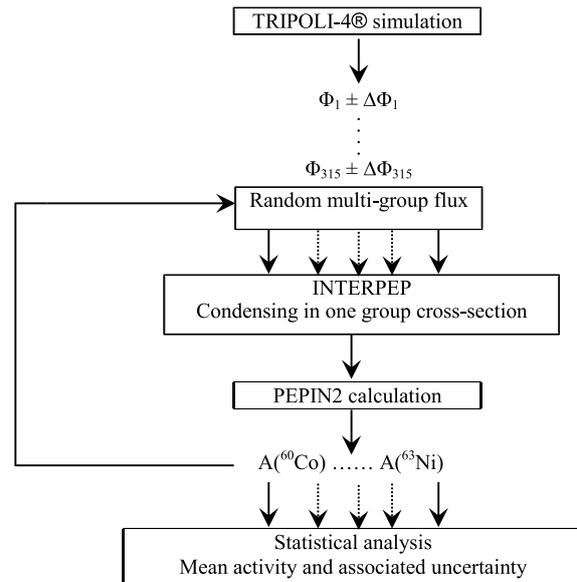


Fig. 5. Scheme of the propagation of stochastic uncertainty using multi-group flux uncertainties. The multigroup flux is estimated with the TRIPOLI-4[®]315 energy groups. Then 30 values are randomly sampled in each of the 315 normal distributions to obtain 30 multigroup flux distribution which are then used as input in the INTERPEP interface program. PEPIN2 gives then access to 30 activity values which are statistically analyzed.

(Fig. 5). For each group, the MC mean flux and standard deviation are used to define a normal distribution in which 30 flux values are randomly selected. For each selected flux, the INTERPEP interface program is used to condense the multigroup cross-sections into one group and then PEPIN2 solves the generalized Bateman equations. For each structure of interest we thus obtained 30 values of activation which are then statistically analyzed to determine the mean activity and the associated uncertainty. Fig. 5 shows the procedure used to propagate the stochastic uncertainty $\sigma_{flux, stoch}$ on MC fluxes to the structures activity.

2.2.2. Propagation of $\sigma_{act, DN}$

The first order deterministic methodology was used to calculate the propagation of uncertainties. This methodology allows the calculation of the covariance of the IC by knowing the profile of sensitivity of the IC and the variance and covariance data of uncertain parameters such as ND. The matrix formula allowing the covariance determination of the IC is the following:

$$Cov(IC) = S(IC|X)Cov(X)St(IC|X) \quad (2)$$

with the profile of sensitivity defined as:

$$S(IC|X) = \frac{\partial IC}{\partial X} / \frac{IC}{X} \quad (3)$$

and

$$X = \left\{ \begin{array}{l} \lambda, \text{ decay constant} \\ br, \text{ branching ratio} \\ \sigma, \text{ group neutronic reaction rate} \end{array} \right\}$$

The result is the diagonal element of the $Cov(IC)$ matrix. The reactions involved in the activation process are obtained by the INVERSION module of DARWIN package. They are reported in Table 1 as well as their relative contribution to the associated isotope production. According to these results we have selected in Table 2 the more representative way of isotope production and taken their associated uncertainty into account in the propagation of ND in the activation reaction. Some reactions have been ignored ((n,p) reactions for example) because their uncertainty contribution cannot be evaluated with

Table 1

Contribution of reactions to the isotope production for the 26 detectors studied here.

Isotope of interest	Isotope production	Contribution
⁶⁰ Co	⁵⁹ Co (n,γ) ⁶⁰ Co	44.3%
	⁵⁹ Co (n,γ) ^{60m} Co	55.4%
	⁶⁰ Ni (n,γ) ⁶⁰ Co	≤ 0.2%
¹³⁴ Cs	¹³³ Cs (n,γ) ¹³⁴ Cs	90.9%
	¹³³ Cs (n,γ) ^{134m} Cs	9.1%
	¹⁵¹ Eu (n,γ) ¹⁵² Eu	100%
¹⁵² Eu	¹⁵³ Eu (n,γ) ¹⁵⁴ Eu	98.4%
	¹⁵³ Eu (n,γ) ^{154m} Eu	1.6%
	⁵⁵ Fe (n,γ) ⁵⁵ Fe	≥ 98.6%
⁵⁵ Fe	⁵⁶ Fe (n,2n) ⁵⁵ Fe	≤ 1.32%
	⁵⁸ Ni (n,α) ⁵⁵ Fe	≤ 0.36%
	⁵⁵ Mn (n,2n) ⁵⁴ Mn	≤ 0.3%
⁵⁴ Mn	⁵⁴ Fe (n,p) ⁵⁴ Mn	≥ 99.7%
	⁶² Ni (n,γ) ⁶³ Ni	≥ 95.2%
	⁶³ Cu (n,p) ⁶³ Ni	≤ 4.8%
⁶³ Ni	⁶⁶ Zn (n,α) ⁶³ Ni	≤ 0.2%

the current version of IncerD. Depending on an internal threshold, some activation reactions are neglected by IncerD. Some parameters do not have associated uncertainty in the libraries. A default perturbation parameter of 1% is directly applied by IncerD in this case (recommendation in IncerD notice) to determine the sensitivity. Uncertainties on decay constant (and branching ratio) and cross-sections are coming from the ND library JEFF 3.1.1 and COMAC (COvariance MAtrices from Cadarache is a covariance file based on JEFF evaluation processes which uses nuclear models and differential measurements) library (Archier et al., 2014, 2015), respectively. To verify the assumption that EAF-2001 and JEFF 3.1.1 libraries lead to the same activity values, we have performed activity calculations with JEFF 3.1.1 library and compared JEFF 3.1.1 results with EAF-2001 results.

3. Results

3.1. Fluence rate calculation

Fig. 6 shows the radial broad group profiles of neutron flux obtained from the analog MC simulation. Group 1 (G1) represents fast neutrons above 0.1 MeV, Group 3 (G3) is the thermal group with energies below 0.4 eV and Group 2 (G2) covers all energies between these limits. This profile behaves qualitatively as expected and illustrates the quite rapid change in neutron spectrum that occurs at various locations through the core regions.:

- neutron flux is highly attenuated in water;
- neutrons are thermalized in the bioshield with a transfer of neutrons between the G1 and G3 groups.

Table 2

Uncertain parameters taken into account in the propagation of ND in the activation reactions.

Isotope of interest	Isotope production (INVERSION results)	Uncertain parameters		
		λ , decay constant	br , branching ratio	σ , 1 group neutronic reaction rate
⁶⁰ Co	⁵⁹ Co (n,γ) ⁶⁰ Co	⁶⁰ Co	(^{60m} Co, ⁶⁰ Co)	⁵⁹ Co (n,γ) ⁶⁰ Co
	⁵⁹ Co (n,γ) ^{60m} Co	^{60m} Co	Default perturbation rate	
¹³⁴ Cs	¹³³ Cs (n,γ) ¹³⁴ Cs	¹³⁴ Cs		¹³³ Cs (n,γ) ¹³⁴ Cs
		^{134m} Cs		
		¹⁵² Eu		¹⁵¹ Eu (n,γ) ¹⁵² Eu
¹⁵² Eu	¹⁵³ Eu (n,γ) ¹⁵⁴ Eu	¹⁵⁴ Eu		¹⁵³ Eu (n,γ) ¹⁵⁴ Eu
		^{154m} Eu		
		⁵⁵ Fe		⁵⁴ Fe (n,γ) ⁵⁵ Fe
⁵⁵ Fe	⁵⁶ Fe (n,2n) ⁵⁵ Fe	⁵⁵ Fe		⁵⁶ Fe (n,2n) ⁵⁵ Fe
		⁵⁴ Mn		⁵⁵ Mn (n,2n) ⁵⁴ Mn
⁵⁴ Mn	⁶² Ni (n,γ) ⁶³ Ni	⁶³ Ni		⁶² Ni (n,γ) ⁶³ Ni
		⁶³ Ni		

TRIPOLI-4[®] statistical standard deviation is also reported. Values vary between 0.0454% and 2.97% for G1, 0.047% and 2.28% for G2 and 0.0342% and 1.51% for G3. The values obtained for the large air gap are 0.386%, 0.525% and 1.51% for G1, G2 and G3, respectively.

In Table 3 are reported neutron fluxes obtained in the bioshield with the reference and the VRT simulations. Simulations were performed on one cpu. Results show that the VRT simulation leads to the same mean flux rate value as the analog simulation and improves the simulation efficiency ε by a factor 100.

The VRT simulation was then used to estimate the flux in various structures of interest. The results were then injected as input data in the DARWIN package to assess the activity levels.

3.2. ⁶⁰Co activation in the bioshield

The evolution of ⁶⁰Co activity with the radial distance in the bioshield is reported in Fig. 7 as well as both uncertainties, $\sigma_{flux, stoch}$ and $\sigma_{act, DN}$. The uncertainty due to ND in the activation reaction is quite low (about 0.7%) but larger than the stochastic uncertainty associated with the MC estimation of the neutron flux (less than 0.3%). At the bioshield surface the ratio C/E is about 1.9. Then the ratio tends to grow with distance into the shield. This general behavior is consistent with all the bioshield isotopes and with previous results reported for the JPDR benchmark (White, 1998). This poor agreement is attributed to the inaccuracy in the geometry, concrete water content and measurement locations for this portion of the JPDR.

3.3. ⁶⁰Co activation in the reactor vessel

The evolution of ⁶⁰Co activity with the radial distance in the reactor vessel is reported in Fig. 8 as well as both uncertainties, $\sigma_{flux, stoch}$ and $\sigma_{act, DN}$. Simulation overestimates experimental data. The ratio of the calculated to experimental (C/E) value is also reported in magenta and varies between 1.08 and 1.23. The uncertainty due to ND in the activation reaction is quite low (about 0.7%). The stochastic uncertainty associated with the MC estimation of the neutron flux varies between 2.5 and 7.4%. The fictive detectors used to estimate the neutron fluence rate in the reactor vessel ($0.5 \times 0.5 \times 20 \text{ cm}^3$) are thinner than the one used to estimate the neutron flux in the bioshield ($2 \times 10 \times 30 \text{ cm}^3$). This could explain the difference observed for these two structures in the estimation of the stochastic uncertainty.

3.4. Activation in the shroud

Evolutions of C/E ratio with axial distance in the shroud are reported for ⁵⁴Mn, ⁵⁵Fe, ⁶⁰Co and ⁶³Ni isotopes in Table 4. Results are quite good on the core mid-plane (C/E varies between 0.95 and 1.31). For other axial positions C/E values are higher especially for ⁵⁵Fe and ⁶⁰Co at $z = 71 \text{ cm}$ and ⁶³Ni and ⁵⁴Mn at $z = -65 \text{ cm}$.

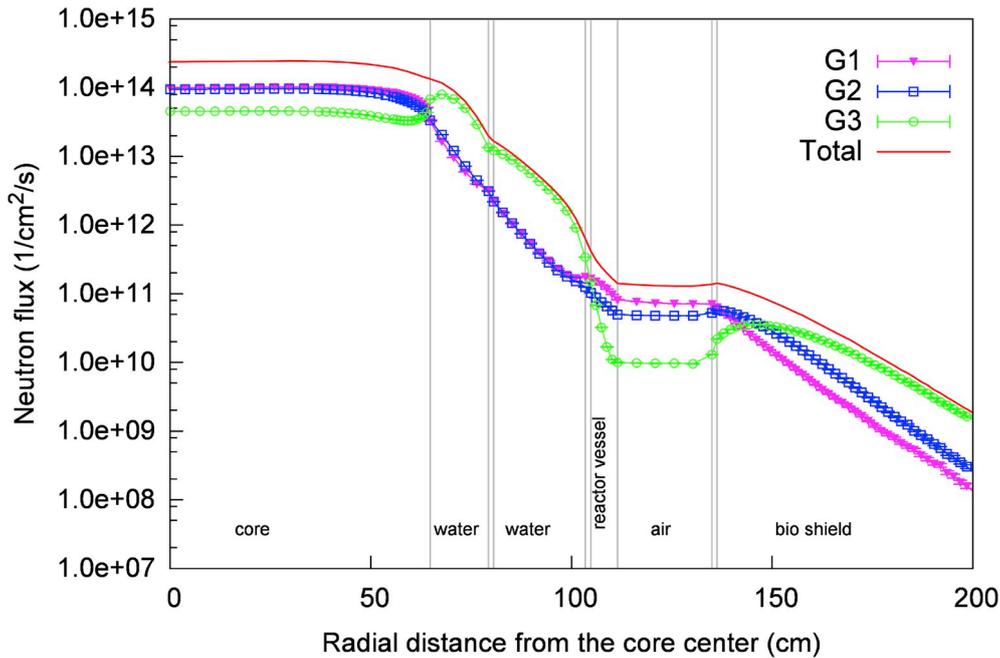


Fig. 6. TRIPOLI-4® three group radial flux profiles obtained at mid-core plane with analog simulation.

Table 3
Validation and figure of merit of the VRT scheme.

	Batches nb (5000 n/ batch)	t(s)	Flux (n/s/ cm ²)	σ (%)	ϵ
REF	100000	1058058	6.99×10^{10}	20.42	2.27×10^{-5}
VRT	19500	929453	6.97×10^{10}	2.17	2.07×10^{-3}

Discrepancies observed at $z = -65$ cm for ⁵⁴Mn can be analyzed more precisely because the benchmark gives 3 values of activity at this distance. The mean value has been used to determine the C/E ratio. ⁵⁴Mn activity varies from 4.57 to 6.91 Bq/g which gives a mean value of

5.45 Bq/g with a standard deviation of 1.27 Bq/g (thus 23.3%). The associated C/E ratio varies between 1.42 and 2.15.

Discrepancies observed for ⁵⁵Fe and ⁶⁰Co are more difficult to understand. The lowest point is localized in the vicinity of the axial plane associated with the lower grid and support plane which could lead to a high uncertainty in measurement. However no uncertainty information is available for the measured data and it is thus complicated to conclude.

In these regions the flux was stochastically obtained with a convergence of 0.5%. The impact of the flux uncertainty on $\{^{55}\text{Mn} (n,2n) ^{54}\text{Mn}\}$ varies between 3.6 and 5.4%. It is less than 1% for $\{^{59}\text{Co} (n,\gamma) ^{60}\text{Co}\}$ and $\{^{54}\text{Fe} (n,\gamma) ^{55}\text{Fe}\}$ reactions.

On the other hand the uncertainty due to ND is less than 1% for

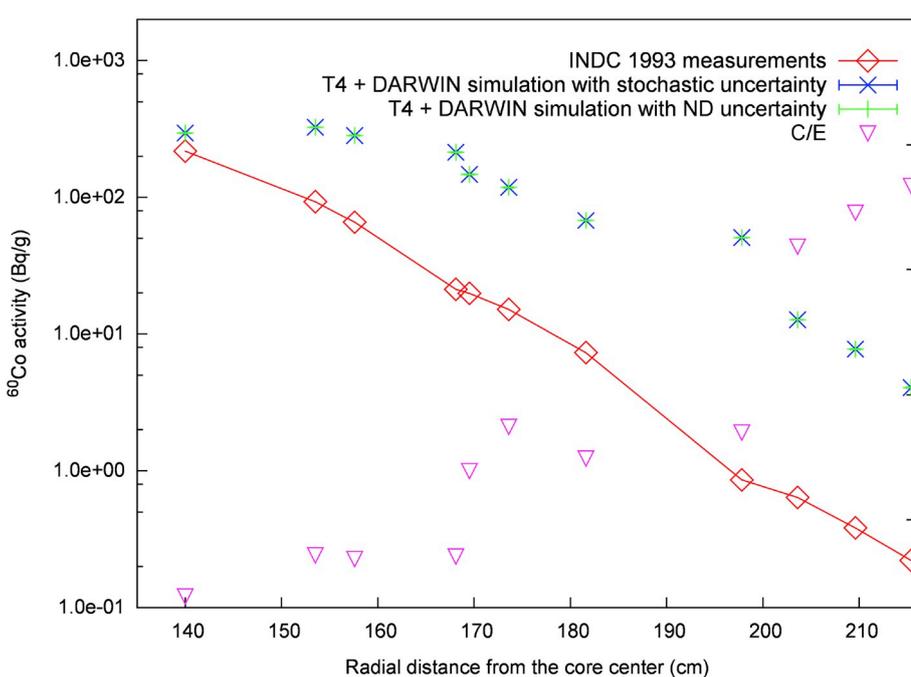


Fig. 7. Comparison of measured (red open squares) and simulated (blue and green crosses) activity values obtained for ⁶⁰Co in the bioshield (at core midplane). In blue line the simulated activity is reported with the propagated flux stochastic dispersion. In green line the simulated activity is reported with the uncertainty due to activation ND. The ratio of calculated-to-experimental value (C/E value) is also reported in magenta. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the Web version of this article.)

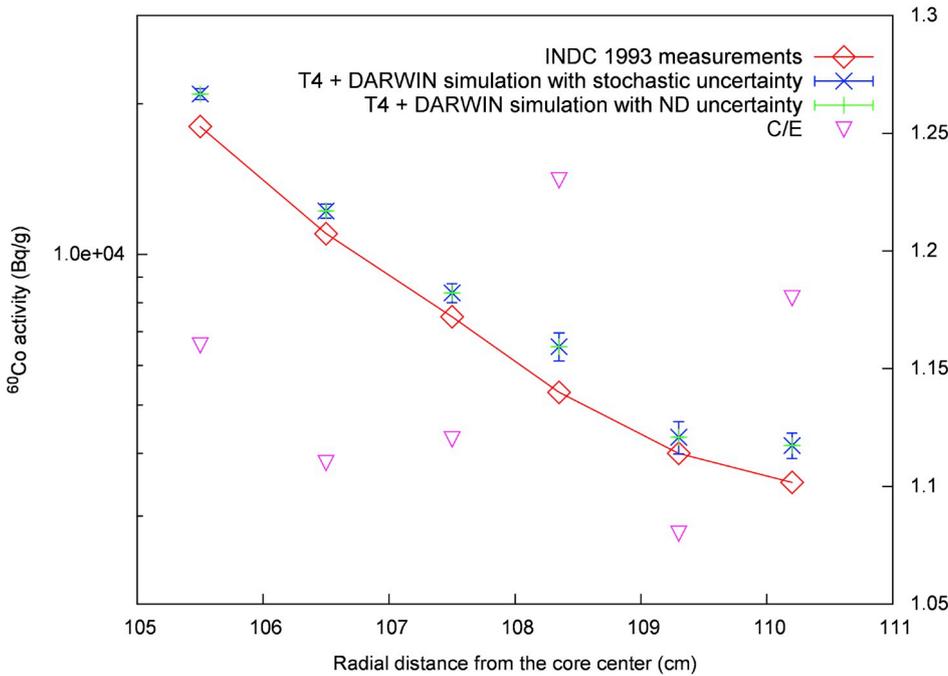


Fig. 8. Comparison of measured (red open squares) and simulated (blue and green crosses) activity values obtained for ⁶⁰Co in the reactor vessel at z = 360 cm. In blue line the simulated activity is reported with the propagated flux stochastic dispersion. In green line the simulated activity is reported with the uncertainty due to activation ND. The behavior of the ratio of the calculated-to-experimental value (C/E value) is also reported in magenta. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the Web version of this article.)

Table 4
C/E values at several axial points the core shroud.

		Axial position (cm)		Associated covariance	
		71	0	-65	
		Core mid-plane			
⁵⁴ Mn	C/E	1.18	0.95	1.81	⁵⁴ Mn decay
	$\sigma_{flux, stoch}$ (%)	3.63	2.66	5.36	⁵⁵ Mn (n,2n) ⁵⁴ Mn
	$\sigma_{act, DN}$ (%)	0.11	0.11	0.13	
⁵⁵ Fe	C/E	1.54	0.97	1.40	⁵⁵ Fe decay
	$\sigma_{flux, stoch}$ (%)	0.59	0.32	0.50	⁵⁶ Fe (n,2n) ⁵⁵ Fe
	$\sigma_{act, DN}$ (%)	3.98	3.98	3.98	⁵⁴ Fe (n, γ) ⁵⁵ Fe
⁶⁰ Co	C/E	1.48	1.18	1.35	⁶⁰ Co and ^{60m} Co decay
	$\sigma_{flux, stoch}$ (%)	0.65	0.46	0.66	(^{60m} Co decay, ⁶⁰ Co) branching ratio
	$\sigma_{act, DN}$ (%)	0.43	0.43	0.43	⁵⁹ Co (n, γ) ⁶⁰ Co
⁶³ Ni	C/E	1.40	1.31	1.56	⁶³ Ni decay
	$\sigma_{flux, stoch}$ (%)	0.47	0.30	0.48	⁶² Ni (n, γ) ⁶³ Ni
	$\sigma_{act, DN}$ (%)	9.2	9.1	9.1	

{⁵⁵Mn (n,2n) ⁵⁴Mn} and for {⁵⁹Co (n, γ) ⁶⁰Co} reactions but higher than 3% for {⁵⁴Fe (n, γ) ⁵⁵Fe} and {⁶²Ni (n, γ) ⁶³Ni} reactions.

3.5. Analysis of uncertainty propagation

To validate the use of COMAC libraries based on JEFF evaluations for the ND uncertainty estimation, we have compared activity results obtained with EAF-2001 ($A_{EAF2001}$) and JEFF 3.1.1 ($A_{JEFF3.1.1}$) libraries:

- in the bioshield and the reactor vessel the ratio $\frac{A_{EAF2001}}{A_{JEFF3.1.1}}$ is about 1.00060 for ⁶⁰Co,
- in the shroud the ratio $\frac{A_{EAF2001}}{A_{JEFF3.1.1}}$ is about:
 - 1.00040 for ⁵⁴Mn,
 - 0.98624 for ⁵⁵Fe,
 - 0.99 936 for ⁶⁰Co,
 - 1.01185 for ⁶³Ni.

The differences of activity levels obtained with both libraries is less

than 2% and COMAC library can thus be used with activity levels obtained with EAF-2001 library to determine ND uncertainties.

IncerD gives access to the impact of uncertainties of:

- decay constants,
- branching ratios,
- cross sections.

Detailed results are reported in Fig. 9. Decay constant uncertainties play an inappreciable role in the range of uncertainties of most of the nuclide activity with a contribution of less than 1%. Only ⁵⁵Fe presents an uncertainty of 3% on the decay constant. Branching ratio uncertainty is available only for (^{60m}Co, ⁶⁰Co): its contribution is about 0.6%. Contribution of cross section uncertainty is the major one with values varying between 0.1% for ⁵⁴Mn and 7.3% for ⁶³Ni.

4. Conclusion

C/E values show good agreement with JPDR benchmark experiments to within $\pm 30\%$ in the reactor vessel where C/E values vary between 1 and 1.25. This good agreement is not achieved in the bioshield: the calculations over-predicted the experimental activities and the error tends to grow with distance in the shield. This observation is consistent with results obtained by other groups (White, 1998) and is attributed to the relatively cursory modeling data available for this portion of the benchmark.

In the shroud C/E values vary between 0.95 and 1.81. Higher discrepancies are observed for the lowest axial point with C/E ratio varying between 1.35 and 1.81.

In conclusion, the general accuracy of the calculations is acceptable considering the complexity of the calculations and the assumptions made. It is also important to mention that no uncertainty information is available for the measured data or material concentrations given in the benchmark. It is thus difficult to explain the poor agreement between simulation and experiments for some points.

This work gives also access to some recommendations for future benchmarks dedicated to the radiological characterization of reactors under dismantling. Material compositions, and especially impurities concentrations, and measurements locations need to be precisely described in the future benchmarks dedicated to dismantling and

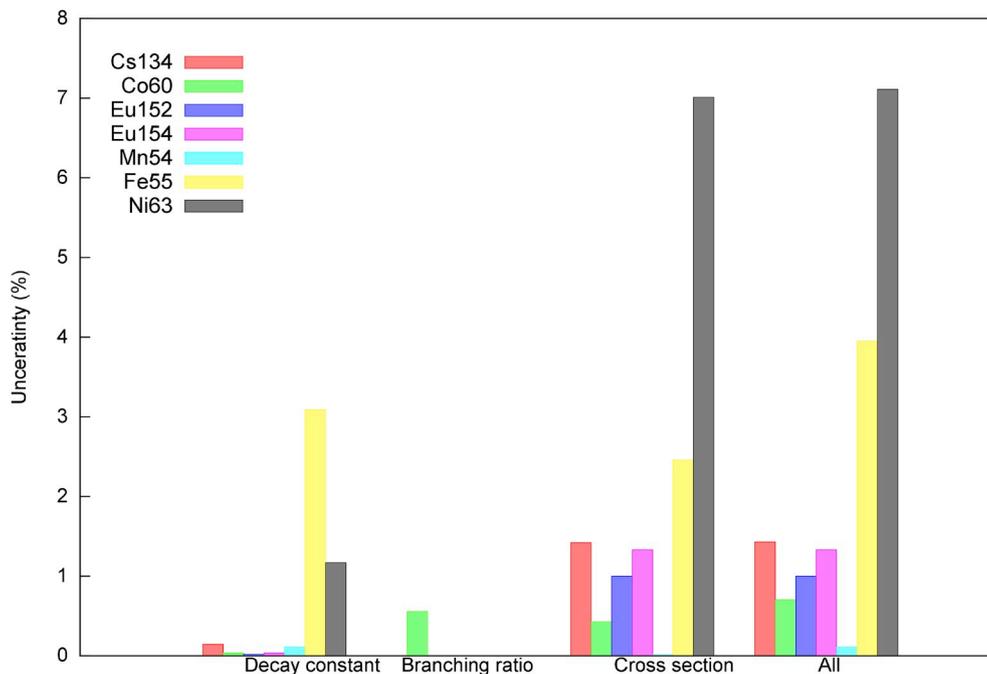


Fig. 9. Elementary contributions to the uncertainty associated to activation computed for 7 major isotopes in a representative case of dismantling process with COMAC (JEFF3.1.1. library).

Table 5

Detailed analysis of elementary contributions to the ^{55}Fe production for the first axial position in shroud (71 cm).

	Elementary contribution to the uncertainty			Associated covariance
	$\sigma_{act, DN}$ (%)	Decay constant (%)	Cross section (%)	
^{55}Fe production	3.98	3.09	2.52	$^{54}\text{Fe} (n, \gamma) ^{55}\text{Fe}$
	3.09	3.09	0	$^{56}\text{Fe} (n, 2n) ^{55}\text{Fe}$
	3.98	3.09	2.52	both reactions

decommissioning to allow an efficient comparison and analysis of the results. Experimental uncertainties should also be indicated to allow a fine analysis of the C/E values.

In this study we also focused our work on the stochastic and ND uncertainty propagation which is often neglected in the inventory calculation dedicated to decommissioning. With the convergence used in this study for the MC simulation, the stochastic uncertainty is less than 1%. Our results highlight that the decay constant has inappreciable impacts on the uncertainty of nuclide activity, except for ^{55}Fe .

For ^{55}Fe production, the contribution of each reaction to the uncertainty $\sigma_{act, DN}$ is specified in Table 5. For almost all isotopes studied here, the uncertainty is mainly carried by (n, γ) reaction. However, in the case of ^{55}Fe production, cross section uncertainty is smaller than the contribution of decay constant uncertainty.

Uncertainties of cross section data have (in general) a larger contribution ranging up to 7.3% for ^{63}Ni . In the future, uncertainties associated to the Boltzman-Bateman coupling ($\sigma_{flux, DN}$) have to be determined to estimate the global uncertainty associated to DEMAIN package results. Such uncertainties can be very useful for industrial partners because they can guide them in the determination of activity margins, especially for radionuclides defined as sensitive by the regulators.

The current benchmark exercise successfully validates the general computational procedure, as well as the use of TRIPOLI-4[®] variance reduction techniques for decommissioning purposes. However this

work is insufficient to fully validate the package and more benchmark and/or experimental data are needed to fully qualify DEMAIN package.

Appendix A. Supplementary data

Supplementary data to this article can be found online at <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2019.103076>.

References

- Archier, P., et al., 2014. COMAC: Nuclear Data Covariance Matrices Library for Reactor Applications. In: PHYSOR 2014 - the Role of Reactor Physics toward a Sustainable Future. American Nuclear Society.
- Archier, P., et al., 2015. In: Go, Yamamoto, Akio (Eds.), COMAC Nuclear Data Covariance Matrices Library for Reactor Applications. JAEA-Conf-2014-003. Tada, Kenichi Chiba, Go, Chiba. Japan.
- Avramova, M., Ivanov, K., 2010. Verification, validation and uncertainty qualification in multi-physics modelling for nuclear reactor design and safety analysis. Prog. Nucl. Energy 52, 602–614.
- Brun, E., et al., 2015. TRIPOLI-4[®]CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code. Ann. Nucl. Energy 82, 151–160.
- Cacuci, D., 2003. Sensitivity and Uncertainty Analysis. Theory, vol. I Chapman & Hall/CRC.
- Chadwick, M., et al., 2011. ENDF/BVII.1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data. Nucl. Data Sheets 112, 2887–2996.
- Fiorito, L., Piedra, D., Cabellos, O., Diez, J., 2015. Inventory calculation and nuclear data uncertainty propagation on light water reactor fuel using ALEPH-2 and SCALE 6.2. Ann. Nucl. Energy 83, 137–146.
- Forrest, R., 2001. The European Activation File EAF-2001 Decay Data Library. UKAEA-FUS-452.
- Forrest, R., Sublet, J., 2001. FISPACT-2001: User Manual. UKAEA FUS 450. EURATOM/UKAEA.
- Garcia-Herranz, N., et al., 2008. Propagation of statistical and nuclear data uncertainties in Monte Carlo burn-up calculations. Ann. Nucl. Energy 35, 714–730.
- IAEA, a. Decommissioning of Facilities Using Radioactive Material. Safety Standards Series WS-R-5.
- IAEA, b. reportRadiological Characterization of Shut Down Nuclear Reactors for Decommissioning Purposes. Technical Reports Series 389.
- Invernizzi, D.C., Locatelli, G., Brookes, N.J., 2017. Managing social challenges in the nuclear decommissioning industry: a responsible approach towards better performance. Int. J. Proj. Manag. 35, 1350–1364. <https://doi.org/10.1016/j.ijproman.2016.12.002>.
- Kocherov, N., 1996. International Benchmark Calculations of Radioactive Inventory for Fission Reactor Decommissioning, vol. 355 INDC(NDS).
- Kuijper, J.C., Oppe, J., Klein Meulekamp, R., Koning, H., 2005. Propagation of cross

- section uncertainties in combined Monte Carlo neutronics and burn-up calculations. In: Proc. Int. Conf. on Mathematics and Computation, M&C 2005, Avignon, France.
- Lahaye, S., Huynh, T., Tsilanizara, A., 2016. Comparison of deterministic and stochastic approaches for isotopic concentration and decay heat uncertainty quantification on elementary fission pulse. EPJ Web of Conferences, vol. 111, 09002.
- NEA Data Bank Computer Program, 2002. ORIGEN2.2: Isotope Generation and Depletion Code, Matrix Exponential Method. Document CCC-0371. Oak Ridge National Laboratory.
- NEA Report, 2013. Radiological Characterization for Decommissioning of Nuclear Installation. Task Group on Radiological Characterisation and Decommissioning (RCD) of the Working Party on Decommissioning and Dismantling (WPDD).
- Nicaise, G., Poncet, B., 2016. A reverse method for the determination of the radiological inventory of irradiated graphite at reactor scale. Kerntechnik 81, 565–570.
- Park, H., Park, S., Jin, H., Song, C., Moon, J., 2016. A study of the decommissioning procedure of an activated structure through an evaluation of the decommissioning cost for a research reactor. Prog. Nucl. Energy 91, 399–410. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2016.03.032>.
- Petit, O., Lee, Y., Diop, C., 2014. Variance reduction adjustment in Monte Carlo TRIPOLI-4 neutron gamma coupled calculations. Prog. Nucl. Sci. Technol. 4, 408–412.
- Rearden, B., Mueller, D., 2011. Uncertainty quantification techniques of SCALE/TSUNAMI. Trans. Am. Nucl. Soc. 104.
- Rossini, S., Bertani, C., De Salve, M., Panella, B., Pistelli, S., 2018. Radiological characterization of the reactor pressure vessel of Trino NPP for dismantling purposes. Prog. Nucl. Energy 107, 17–30. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2018.04.001>.
- Santamarina, A., Bernard, D., Rugama, Y., 2009. The JEFF-3.1/-3.1.1 nuclear data library. Tech. Rep. 22.
- Sanz, J., 2000. ACAB Activation Code for Fusion Applications: User's Manual v5.0. UCRL-MA-143238. Lawrence Livermore National Laboratory.
- Sukegawa, T., Hatakeyama, M., Yanagihara, S., 2000. Evaluation of methodology on radioactive inventory estimation in the Japan power demonstration reactor decommissioning program. J. Nucl. Sci. Technol. 37, 367–371.
- Sukegawa, T., Sasamoto, N., Fujiki, K., 1993. Accuracy Verification for Calculation of Inventory in JPDR due to Neutron Activation, vol. 164 INDC(JPN).
- Tsilanizara, A., Diop, C.M., Nimal, B., et al., 2000. Darwin: an evolution code system for a large range of applications. J. Nucl. Sci. Technol. 37, 845–849.
- Werner, C., 2017. MCNP User's Manual, Code Version 6.2. LA-UR-17-29981, Accessed date: 27 October 2017.
- White, J., 1998. Updated results for the JPDR activation analysis benchmark using VITAMIN-B6 and BUGLE-96 data. In: Radiation Protection and Shielding Topical Meeting. Nashville, Tennessee.
- Williams, M., Weisbin, C., 1978. Sensitivity and Uncertainty Analysis for Functionals of the Time Dependent Nuclide Density Field. Tech. Rep. ORNL-5393. Oak Ridge National Laboratory (ENDF-236).
- Woollam, P., Pugh, I., 1978. Neutron induced activation, waste disposal and radiation levels for the reactor island structure of a decommissioned Magnox power station. In: Proceedings of the Symposium Decommissioning of Nuclear Facilities.
- Yanagihara, S., et al., 1994. The Japan power demonstration reactor decommissioning program. In: Int. Symp. On Decontamination and Decommissioning.

Chapitre 11

Facteurs influençant les niveaux d'activité

Le coeur du processus de démantèlement est la production et la gestion de déchets radiologiques. D'un point de vue industriel plusieurs inhibiteurs peuvent pénaliser le processus et induire un coût financier supplémentaire. Les incertitudes sur l'état initial et la caractérisation du terme source constituent un risque qui doit être traduit au niveau financier. Pour quantifier la marge financière associée, il est nécessaire de lister la source des incertitudes affectant la caractérisation initiale du site et de déterminer leur impact sur le produit industriel final : le déchet et son niveau d'activité. L'incertitude sur les calculs d'activation impacte également le délai minimum à respecter avant la réalisation des opérations de démantèlement ainsi que le délai à respecter avant le transfert des déchets vers le centre d'entreposage. Une série de mesures est nécessaire pour valider l'incertitude associée (débit de dose gamma, spectrométrie gamma, analyses radiochimiques).

Les différentes sources d'incertitude peuvent être triées en trois catégories :

- Les données d'entrée

Le coeur du réacteur constitue la source principale de neutrons et son modèle doit être représentatif de la réalité en ce qui concerne les neutrons rapides. Ce sont en effet ces derniers qui, transportés jusqu'aux structures entourant le coeur, participeront à l'activation de ces dernières. C'est pourquoi les assemblages périphériques et le flux induit par ceux-ci se doivent d'être modélisés finement.

Les modifications du coeur au cours de son histoire (changement complet de coeur, rechargement, mouvement des barres ou croix de contrôle, présence d'absorbant dans le modérateur) se doivent également d'être considérés pour le calcul. De telles modifications peuvent en effet avoir des impacts non négligeables sur le spectre de neutrons et/ou la distribution du flux neutronique.

La géométrie et la composition des structures qui sont activées doivent être connues précisément. Le niveau d'impuretés des matériaux est en particulier un facteur sensible puisqu'il induira le niveau d'activité des radionucléides dans l'inventaire final.

- La physique du problème

L'activation des structures du réacteur est due aux neutrons rapides du coeur qui une fois thermalisés sont capturés par réaction (n,γ) . Ainsi, en fonction de la gamme en énergie des neutrons considérés, les réactions prises en compte ne sont pas les mêmes et donc les radio-

nucléides produits sont également différents.

Les éléments radioactifs contribuant le plus à l'inventaire de l'état initial sont en général :

- le ^{54}Mn , émetteur beta et gamma à 800 keV créé par réactions (n, p) sur le ^{54}Fe et $(n, 2n)$ sur le ^{55}Mn : sa teneur est caractéristique du flux rapide,
 - le ^{51}Cr émetteur beta et gamma (300 keV) est intéressant pour quantifier l'incertitude sur les flux thermique et épithermique de part son émission par capture sur le ^{50}Cr mais également pour quantifier l'incertitude sur le flux rapide de part son émission par réaction (n, α) sur le ^{54}Fe ,
 - le ^{58}Co , émetteur beta et gamma (800 keV) formé à partir des réactions de type (n, p) sur le ^{58}Ni ,
 - les émetteurs beta purs ^{59}Ni et ^{63}Ni et l'émetteur beta et gamma ^{94}Nb sont prépondérant pour les colis-cuve aux temps élevés de refroidissement,
 - le ^{60}Co émetteur beta et gamma (1100 keV) formé par réaction de capture sur le ^{59}Co est prépondérant dans l'exposition externe induite par les structures en acier.
- Les biais de modélisation
- Modéliser de façon précise la vie d'un réacteur est aujourd'hui complexe. De nombreuses modifications ont lieu au cours de l'histoire du réacteur et elles ne peuvent pas toutes être prises en compte dans le modèle utilisé pour estimer les niveaux d'activité des structures englobant le coeur. C'est pourquoi des coeurs "moyens" sont utilisés pour chaque phase importante de l'histoire du réacteur. Ces hypothèses peuvent induire des biais dans les résultats qu'il convient d'estimer à l'aide d'études d'impact. Citons par exemple l'influence de la position des absorbants sur l'activation des structures proches du coeur.

Dans l'article présenté dans ce chapitre ces différentes sources d'incertitudes ont été étudiées et leur impact individuel sur l'inventaire final a été analysé.



Contents lists available at ScienceDirect

Annals of Nuclear Energy

journal homepage: www.elsevier.com/locate/anucene

Parameters influencing the activation of dismantling nuclear facility structures

C. Le Loirec^{a,*}, C. Riffard^a, F. Barran^a, V. Bellanger^a, Y. Penelieu^a, M. Villard^b, X. Berson^b, F. Jeury^a, R. Eschbach^a^a CEA, DEN, Cadarache, DER, SPRC, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France^b CEA, DAM, Cadarache, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 February 2019

Received in revised form 27 May 2019

Accepted 30 May 2019

Keywords:

Decommissioning

Activation

TRIPOLI-4[®]

DARWIN

Uncertainty

IncerD

ABSTRACT

Only 13 nuclear power plants have been completely decommissioned worldwide. The core of the dismantling process is the production and the management of radiological wastes. Radiological characterization of components is thus of utmost importance. Because in situ measurements of the radionuclides inventory can be technically difficult, application of computational approaches based on neutron transport calculations and radionuclide inventory calculations are now used for initial characterization. This characterization is marred by uncertainties that can penalize the dismantling process and induce supplementary financial costs. To date, only some studies deal with the analysis of these sources of uncertainties. In this study, we present a new code package based on CEA codes for the radiological characterization of facilities under decommissioning and we analyze the impact of some input data and the influence of some modeling biases. We also estimate the impact of some nuclear data uncertainties on the final radionuclides inventory.

© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The first generation of nuclear power plants and reprocessing facilities are coming to the end of their working lives. The average age of a nuclear power plant in Europe is 29 years and the approved operating life is 30–50 years, depending on the design. There are currently 91 power plants already shut down and being decommissioned in Europe; the majority of the remaining 129 reactors fuel cycle facilities will also be in decommissioning by 2030. To date only 13 nuclear power plants have been completely decommissioned worldwide and therefore technical experience is somewhat limited (Judge and Regan, 2017).

The core of the dismantling process is the production and the management of radiological wastes and depolluted sites. In an industrial point of view three main inhibitors can penalize the process efficiency and induce a supplementary financial cost: initial state uncertainties, respect of ALARA (As Low As Reasonably Achievable) principles, waste evolution and transformation from its source until its facility output. Initial state uncertainties have to be managed in the process by using margins for the scenario definition, the operations and the safety analysis. These uncertain-

ties constitute a risk which has to be translated in financial costs. The estimation and optimization of this parameter largely depend on methods used to initially characterize the radiological source term of the facility.

In the dismantling process, the radiological characterization of components is thus of utmost importance as the isotopic composition will determine the action planning and assign the most significant disposal route for nuclear waste. In situ measurements of the radionuclides inventory can be technically difficult because of the high dose rate encountered, access limitations and geometry complexity. In such cases, application of computational approaches based on neutron transport calculations and radionuclide inventory calculations has been shown to be a powerful tool. For example, (Cho, 2012) developed an automatic source term characterization program dedicated to CANDU reactors. The program is equipped with a convenient graphical user interface and MCNP (Briesmeister, 2000) and ORIGEN2 (NEA Data Bank Computer Program, 2002) codes are used for the neutron transport calculation and activation analysis, respectively.

In such approaches dedicated to activation estimation, it is mandatory to know neutron flux distribution in both energy and space. An essential part of the simulation is thus the representation of the core to map the appropriate neutron emission. Several parameters can affect the estimation of neutron flux distribution

* Corresponding author.

E-mail address: Cindy.LELOIREC@cea.fr (C. Le Loirec).

in the ex-core regions. It has been shown by (Schlomer et al., 2017) that only the outer fuel assembly regions influence the leaking neutron flux and spectrum and thus the activation in the ex-core regions. Moreover, when only the thermal neutron flux is considered for calculations, the most important reaction is (n,γ) and the greatest activities correspond to the following radionuclides: ^{59}Ni , ^{63}Ni , ^{55}Fe and ^{60}Co . If the complete spectrum of neutron flux is considered for calculations, nearly all reactions are considered and the radioisotopes produced are the following: ^{14}C , ^{28}Al , ^{36}Cl , ^{54}Mn , ^{46}Sc , ^{55}Fe , ^{60}Co , ^{59}Ni , ^{63}Ni , ^{65}Zn , ^{94}Nb , ^{93}Mo , $^{108\text{m}}\text{Ag}$, $^{110\text{m}}\text{Ag}$, ^{152}Eu , ^{154}Eu and ^{178}Hf (Rodenas, 2017). Most of these isotopes are produced by material composition and trace element concentration in the core structures:

- C, Si, Ni, V, S, Mn, Cr, Al, P, Cu, Mo, Fe, Nb, Ta, Co and Ti in steels;
- Al, C, Ca, Fe, H, K, Mg, Mn, Na, O, Si, Co, Nb, Mo, Sn, Eu, Hf and Zn in concrete.

In the context of nuclear wastes, after a few years from shut-down the relevant isotopes are mainly:

- ^{60}Co for steels. It is produced by capture reaction on ^{59}Co . In steels ^{59}Co is present from few hundred of part per million (ppm) in carbon steels (reactor pressure level for example) to thousands of ppm in stainless steels. ^{60}Co is a (β, γ) emitter (1173, 1332 keV γ rays) and plays a major role in the external exposition of operators, especially during D&D activities.
- ^{152}Eu and ^{154}Eu ((β, γ) emitter). They are the dominant activation products in typical concretes.
- ^{59}Ni et ^{63}Ni (pure β emitters) and ^{94}Nb ((β, γ) emitter). These isotopes are decisive for the estimation of waste activity for long cooling times.
- ^{54}Mn . It is a (β, γ) emitter (835 keV γ rays) produced by (n,p) reaction on ^{54}Fe and $(n,2n)$ reaction on ^{55}Mn ; its concentration is representative of the fast neutron flux.
- ^{36}Cl , ^{94}Nb , $^{108\text{m}}\text{Ag}$, ^{152}Eu and ^{14}C . These isotopes are very sensitive to handle because their massic activity can limit the transfer of related steels to the French dedicated storage center (CSFMA for Storage center of small and moderate activities or Centre de Stockage des Faibles et Moyennes Activités in French). ^{63}Ni and ^{93}Mo activity values are also controlled but Ni and Mo concentration in steels are now piloted by industrials and the limits are rarely exceeded (Ouzounian et al., 2012).

Core modifications during the reactor's operating history have also to be taken into account to assess the exact activation, as it permits to know the irradiation time. Core modifications also affect the neutron spectrum (thermal/fast) and, in some cases, reactor history can have a power increase. These need to be taken into account by creating separate models for different core configurations and adding their effect to structure activation separately. Moreover, models do not usually take into account the diffusion of some radionuclides in the material, like tritium (Takeishi, 2018) or ^{137}Cs (Boden et al., 2013) for example, because the determination of effective diffusion coefficient can be very hard to determine (Wattez et al., 2015). However, one should keep in mind that such effect can have a large impact on total activities, since e.g. associated reaction can have a huge cross section.

These technological and historical parameters induced biases in neutron flux estimation. Additional parameters associated with modeling assumptions (errors in the assumed power distribution, in the geometrical representation of the reactor and uncertainties in the impurity levels of the material compositions) and nuclear data (ND) accuracy (uncertainties in the ND transport and in the ND related to the activation processes) are expected to introduce

significant uncertainties in activity estimations (Kontogeorgakos et al., 2011). To date, only some studies deal with the analysis of these sources of uncertainties for decommissioning purposes.

In this study, we present a new code package based on CEA codes for the radiological characterization of facilities under decommissioning. As requested by the French regulation (Autorité de Sûreté Nucléaire, 2017; French Parliament (National Law), 2012) a Verification-Validation and Uncertainty Quantification (VVUQ) process (Vaglio-Gaudard, 2013; Avramova and Ivanov, 2010) is under progress (Le Loirec et al., 2018; Soulard et al., 2018) to determine and quantify the different sources of uncertainty and biases. In the current study, we analyze the impact of some input data (namely control rods position, boron concentration and impurities concentration) and the influence of some modeling biases. We also estimate the impact of some nuclear data uncertainties on the final radionuclides inventory.

2. Description of the modeled nuclear facility

The nuclear facility modeled in this study is a reactor currently in dismantling at CEA Cadarache. It has been modeled in details to determine the radiological inventory and the activation of its internal structures induced by the neutronic irradiation of the steel constituting the components. The reactor is composed of a core surrounded by a square cross-section shroud which can channel the primary water in the core. The shroud is centered on the lower support plate and can expand freely longitudinally. It is maintained by a cylindrical shield which can support the core through the lower support plate. The support plate is fixed on the lower grid through legs and is locked on a shoulder of the shield. The shield is inserted in the cylindrical part of the basket thanks to a shoulder. The main grid is placed just above the core and allows the centering of fuel elements and control rods. See Fig. 3 for more details concerning the reactor structures geometry.

The internal structures of the vessel are all represented by 26bisN steel. The reactor vessel consists of a carbon steel wall with a thin 26bisN buttering layer. Experimental data have been provided to model the different steel grades of the structures. The composition used for the shroud corresponds to the average of the 2 experimental analyses, the compositions used for the shield, the basket and the VSD correspond to the average of the 3 experimental compositions obtained for the corresponding ferrules.

3. Code system for inventory calculation

DEMAIN (Dismantling and Decommissioning of Nuclear Facilities - Démantèlement et Assainissement des Installations Nucléaires in French) is a code system developed by the CEA. It is devoted to the radiological characterization of reactors in decommissioning phase. It is composed of 4 main steps reported in Fig. 1 (Core calculation, Neutron transport, Activity inventory calculation, Gamma transport).

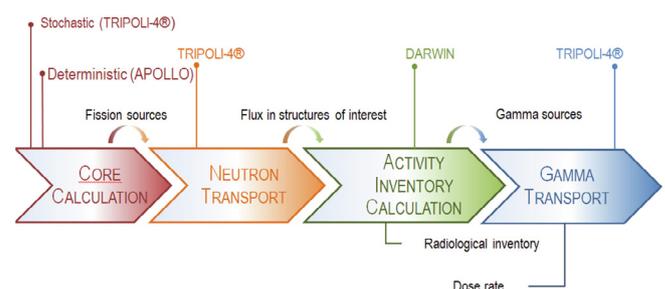


Fig. 1. DEMAIN code system.

Fission sources can be determined with a full Monte Carlo (MC) core model by using TRIPOLI-4® (v4.10) (Brun, 2015) or with a deterministic code such as APOLLO2 (Sanchez, 2010). In this study, core calculation has been performed in a deterministic way and relies on two steps known respectively as lattice and core calculations (Faure, 2018). The lattice calculations are performed with the deterministic neutron transport code APOLLO2, 281 SHEM energy groups (Hfaiedh and Santamarina, 2005) and CEAV512 cross section library which comes from JEFF3.1.1 evaluation (Santamarina, 2009). At this step, each type of assembly is represented by an infinite lattice of identical assemblies. In this study, three different types of assemblies are taken into account: the fixed assemblies (FAO) which do not have any absorbing rods, the fixed assemblies (FA) which are composed of fixed absorber rods and the moving assemblies (MA) which are composed of mobile control rods. The collapsed and homogenized cross sections obtained with APOLLO2 and called SAPHYB libraries are then automatically handled by the CEA 3D deterministic code CRONOS2 (Lautard, 1990) for core calculations. In this study, core calculations are performed to get the homogenized composition of each assembly and the distribution of the fission sources in the core.

Core calculation results are then used in the MC based neutron transport step to describe the reactor core and the associated sources. The calculations are performed with TRIPOLI-4® (v4.10) and CEAV5.1.2 data library based on JEFF 3.1.1 (Santamarina, 2009) in order to determine the neutron fluence rates in different material regions: shroud, shield, basket, lower and main grids and support plate. The neutron fluence rates are calculated at the nominal power rating conditions and each flux is homogenized in a limited number of energy groups (TRIPOLI 315 groups).

The neutron fluence rates are then used to model the activation processes of different nuclides with DARWIN2.3 package (San Felice et al., 2013; Tsilanizara, 2000). The nuclear data library used for activation calculation is EAF-2001 (Forrest, 2001). The irradiation history is modeled according to data reported in the operating documents. It is composed of 4 power levels as represented in Fig. 2. Core management has not been taken into account. Besides, this assumption offers the advantages of modeling new fuel assemblies, without any uncertainty on fuel composition.

3.1. Determination of fission source parameters

3.1.1. Lattice calculations

According to the assumptions made on the assemblies concerning the control rods positions, several SAPHYB libraries are generated:

- one for the FAO assemblies,
- one for the FA assemblies,
- three for the MA assemblies, according to the position of the control rods.

Geometry used to describe the assemblies corresponds to a quarter of an assembly. Collapsed and 4 groups homogenized cross sections are performed during this step. Nominal APOLLO2 calculations are performed at t0, thus with the initial fuel composition, with a moderator temperature of 285°C and for 500 ppm boron concentration, corresponding to the first irradiation cycle.

3.1.2. Core calculations

In a first step SAPHYB libraries are loaded and the reactor core is created. The reactor core is mainly composed of UOx PWR type fuel rods. Control rods of FA and MA assemblies are then positioned according to the first irradiation cycle: fixed control rods are fully inserted and mobile control rods are positioned at 35 cm from the fuel bottom. Neutronic calculation is performed for t0 and TRIPOLI-4® data are generated thus: core geometry and composition, spatial distribution and energy spectrum of fission sources. A specific sub critical approach scheme is used to generate core composition, spatial distribution and energy spectrum of fission sources on a fine mesh (2.15 cm × 2.15 cm × 7.264 cm cells). This fine core composition is then modified to represent the core by different mixtures representing the different types of assemblies. The initial number of spatial bins (25 radial bins per quarter of lattice and 25 axial bins) are kept to describe the fission sources distribution in TRIPOLI-4®. Sources are independent on time and isotropically emitted. Neutronic production rates on the different fissile isotopes are grouped on both uranium and plutonium elements. For each element, the spectrum is calculated with Watt formula:

$$S(E) = C \times e^{-a \times E} \times sh\sqrt{b \times E} \quad (1)$$

and the following coefficients:

- for uranium fissions:
 - $E_{sup} = 19.64$ MeV,
 - $E_{inf} = 0.001$ MeV,
 - $a = 1.012$ MeV⁻¹,
 - $b = 2.249$ MeV⁻¹.
- for plutonium fissions:
 - $E_{sup} = 19.64$ MeV,
 - $E_{inf} = 0.001$ MeV,
 - $a = 1.035$ MeV⁻¹,
 - $b = 2.849$ MeV⁻¹.

3.2. Neutron transport calculation

3.2.1. Structure geometries and materials

The main structures of interest of the reactor are:

- flow rate separation shell (VSD) and device grid,
- main grid, shroud and support plate,
- lower grid, shield and basket.

Internal structures of the reactor vessel are composed of stainless steel. The reactor vessel is composed of carbon steel with a stainless steel smearing (about 6 mm thick). Experimental data have been used to properly describe the different stainless steel grades used for the different structures. Structures localized on the bottom and at the top of the core (main and lower grids and support plate – see Fig. 3) present lots of holes. A precise description of such geometry details in the MC model can lead to high computation time for the fluence rate determination (lots of interfaces to take into account). In order to optimize the MC calcula-

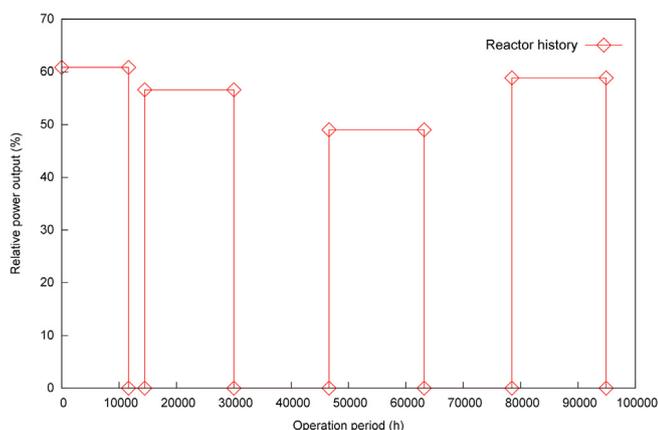


Fig. 2. Reactor history. Relative power output corresponds to relative power (in%).

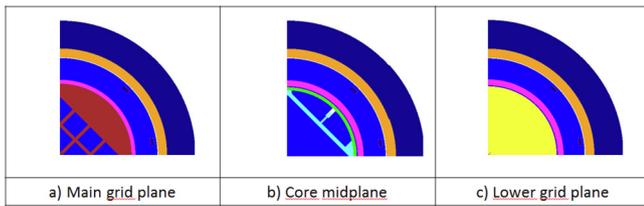


Fig. 3. MC model of the reactor studied here. The main structures are plotted in green for the shield, in magenta for the basket and in cyan for the shroud. The main grid is reported in dark red and the lower grid in yellow. Water is reported in blue and reactor vessel in orange. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

tions, we have thus represented these structures (lower and main grids and support plate) as mixtures. The weight percentage of each material composing the structures is conserved. To validate the model, the volume of each structure is determined by TRIPOLI-4[®] (CALCULATION module) and compared with data given by the constructor. Moreover flux estimation were performed on each grid with and without homogenization and no difference was found between both results.

3.2.2. Fluence rate determination in the structures of interest

The fluence rate is determined with 315 energy groups. The structures of interest mentioned above have been meshed in order to correctly take into account the radial distribution of the neutron flux. For the structures with a geometry too complicated to be meshed, the geometry is splitted into small parts called cells. The mesh definition is dependent on the structure and so 7 different meshes have been defined with the EXTENDED_MESH functionality of TRIPOLI-4[®]:

- according to its structure, the basket is axially divided in 5 parts; each part is then meshed with one radial bin and several axial bins (between 7 and 13 according to the axial part considered); four angular sectors are also defined; the basket is thus composed of 100 meshes and 2 cells.
- the shield is composed of 56 meshes: 14 axial bins, one radial bin and 4 angular sectors;
- the shroud has a square section and each branch of the square is meshed with 20 bins; the shroud is divided into 12 axial bins; it is thus composed of 1104 bins in order to get a precise estimation of the fluence rate;
- the support plate and the 2 grids are meshed as a ring of 3 concentric circles and one axial mesh; four angular sectors are defined; each structure is described with 12 meshes;

3.3. Activity calculation

The neutron fluence rates obtained in the structures of interest (shroud, shield, basket, main grid, support plate, lower grid) are then used to model the activation chains of different nuclides with DARWIN package (v2.3). The INTERPEP interface program uses the neutron fluence rates obtained by TRIPOLI-4[®] to condense the multigroup cross-sections. Then PEPIN2 solves the generalized Bateman equations which govern the time dependence of isotope concentrations. Operating history (see Table 1) is interpreted in simplified form with constant power during each of four operational cycles. The four constant operating powers are determined in such a way that the integrated power over the duration of each cycle corresponds to the energy actually extracted at the end of each cycle. Cooling and operating cycles are taken into account in the activation calculation. The computation of the inventory

Table 1
Operational history of the reactor.

Cycle beginning (h)	Cycle end (h)	Power Cycle (%)
0	11640	60.83
11640	14472	0
14472	30024	56.60
30024	46608	0
46608	63192	49.02
63192	78480	0
78480	94920	58.85

cooling down gives the activation of the structures at the date of interest thus more than 20 years after the shut-down.

4. Study of biases, sensitivities and uncertainties

4.1. Reference calculation

The reference configuration corresponds to the fresh core setup:

- 500 ppm boron concentration,
- half of the FA assemblies have the control rods fully inserted (FCB (Fin Course Basse in French or End Run Low) position),
- half of the FA assemblies have the control rods fully risen (FCH (Fin Course Haute in French or End Race High) position),
- mobile control rods of MA assemblies are positioned at 35 cm from the fuel bottom,
- neutron fluence rate is estimated in 315 energy groups,
- cooling and operating cycles of the history are taken into account.

In the following, for each impact study, only one parameter is modified to determine its individual influence on the activity estimation.

4.2. Sensitivity of input data

4.2.1. Impact of control rods position

Three positions of the mobile control rods have been studied: 35 cm, 120 cm and FCH location. The last position corresponds to the case where all control rods of MA assemblies are up. For each rod position, fission sources and core mixtures have been determined with the CRONOS2 deterministic code and then injected in the MC simulation.

4.2.2. Impact of soluble boron concentration

We can assume that a simulation without any soluble boron and with all the mobile rods up should be conservative. To study this case, the fission sources and core mixtures have been determined with the deterministic code CRONOS2 when no boron is injected in the reactor and when the mobile control rods are positioned at the FCH location. The sources and mixtures obtained have then been injected in the MC simulation to determine the fluence rate and then the activation of the different structures of interest.

4.2.3. Impact of impurities concentration

Impurities concentrations used in the reference simulation are based on experimental data. For each structure several compositions were available according to the position where the sample was extracted. In a first assumption, we used the mean composition to represent the structures. In order to analyze the sensitivity of activation calculations due to impurity concentrations, activation calculations have been performed by maximizing cobalt or niobium percentages and by reporting the difference on iron. Cal-

culations have been performed for 3 structures, which lead to 5 different configurations:

- in the shield, niobium percentage is increased from 0.613 to 0.8%;
- in the shroud:
 - cobalt percentage is increased from 0.061 to 0.07%;
 - niobium percentage is increased from 0.46 to 0.49%;
- in the basket:
 - cobalt rate is growing from 0.045 to 0.059%;
 - niobium rate is growing from 0.623 to 0.810%.

To determine the impact of impurity percentages on structures activation, a sensitivity factor is defined as:

$$S = \frac{\frac{\Delta A}{A}}{\frac{\Delta C}{C}} \quad (2)$$

with ΔA , the variation of activity and ΔC the variation of impurity concentration between the reference and the perturbed case.

4.3. Modeling biases

4.3.1. Influence of energy mesh

A calculation with 172 energy groups has been performed in order to study the impact of this parameter on the activation.

4.3.2. Influence of operating history

In a first step, intermediate cooling periods have been neglected in order to study their impact on the activation.

In a second step, we have detailed the last phase of the operating history and we have studied the impact on the activity values. Two discretizations have been chosen according to the data available:

- in the first discretization (called "Simple" in the following) the last phase is splitted in 4 operating phases and 1 cooling phase;
- in the second discretization (called "Detailed" in the following) the last phase is splitted in 6 operating phases and 2 cooling phase.

The relative powers of each phase for both discretization are reported in Table 2.

Table 2

Operational history of the reactor. The last phase is detailed according to 2 discretizations called "Simple" and "Detailed".

Cycle beginning (h)	Cycle end (h)	Power Cycle (%)
0	11640	60.83
11640	14472	0
14472	30024	56.60
30024	46608	0
46608	63192	49.02
63192	78480	0
<i>Simple Discretization</i>		
78480	79728	0
79728	86088	53.627
86088	89232	53.916
89232	92904	92.697
92904	94248	86.693
<i>Detailed Discretization</i>		
78480	79728	0
79728	81768	83.428
81768	84408	64.725
84408	86088	0
86088	89232	53.916
89232	91248	97.928
91248	92904	86.329
92904	94248	86.693

4.4. Modeling uncertainties

Assuming no uncertainties in the initial nuclide densities, uncertainties can be found in all the parameters involved in the evolution of the material composition due to neutron irradiation. The uncertainty due to physics stems from two sources:

- the uncertainty $\sigma_{(flux, DN)}$ in the neutron fluence rate due to uncertainties in the ND in the materials involved in the calculations: it is depending on the different reactions encountered by the neutrons. In this estimation there can also be a contribution due to statistic, as neutron fluence rate is stochastically obtained by MC methods. Consequently, the variance due to statistics $\sigma_{(flux, stoch)}$ needs to be estimated separately in order to obtain the variance in ND. This stochastic uncertainty $\sigma_{(flux, stoch)}$ should also be propagated to the final activity value. The impact of $\sigma_{(flux, stoch)}$ has already been investigated in other studies (Le Loirec et al., 2018; Soulard et al., 2018): it has been shown that when the MC simulation has achieved sufficient convergence (integrated $\sigma_{(flux, stoch)} \leq 5\%$), the impact of $\sigma_{(flux, stoch)}$ can be neglected.
- the uncertainty $\sigma_{(act, DN)}$ due to uncertainties in decay constant λ , branching ratio br and effective cross-section (of the activation reaction to the local neutron flux) was estimated with the latest version of IncerD (Lahaye et al., 2016) by using the sensitivity coefficients obtained for the isotopic concentration (IC). The first order deterministic methodology was used to calculate the propagation of uncertainties. This methodology allows the calculation of the covariance of the IC by knowing the profile of sensitivity of the IC and the variance and covariance data of uncertain parameters such as ND. The matrix formula allowing the covariance determination of the IC is the following:

$$Cov(IC) = S(IC|X)Cov(X)S^t(IC|X) \quad (3)$$

with the profile of sensitivity defined as:

$$S(IC|X) = \frac{\partial IC}{\partial X} / \frac{IC}{X} \quad (4)$$

and

$$X = \left\{ \begin{array}{l} \lambda, \text{ decay constant} \\ br, \text{ branching ratio} \\ \sigma, \text{ 1 group neutronic reaction rate} \end{array} \right\}$$

The result for uncertainties is the diagonal element of the $Cov(IC)$ matrix. The reactions involved in the activation process are obtained by the INVERSION module of DARWIN package. Depending on an internal threshold, some activation reactions are neglected by IncerD. Uncertainties on decay constant (and branching ratio) and reaction rates are coming from the ND library JEFF 3.1.1 and COMAC library (Archier et al., 2015), respectively. To verify the assumption that EAF-2001 and JEFF 3.1.1 libraries lead to the same activity values, we have performed activity calculations with JEFF 3.1.1 library and compared JEFF 3.1.1 results with EAF-2001 results.

5. Results

5.1. Neutron flux on the structures of interest

In Fig. 4 is reported the variation of the axial condensed flux for the 3 most massive structures of the reactor. According to the extended mesh chosen for each structure, the axial flux corresponds to the mean of the 4 angular sections for the basket and the shield and to the center position of the square sides for the shroud. Due to the position of the control rods, the profiles are

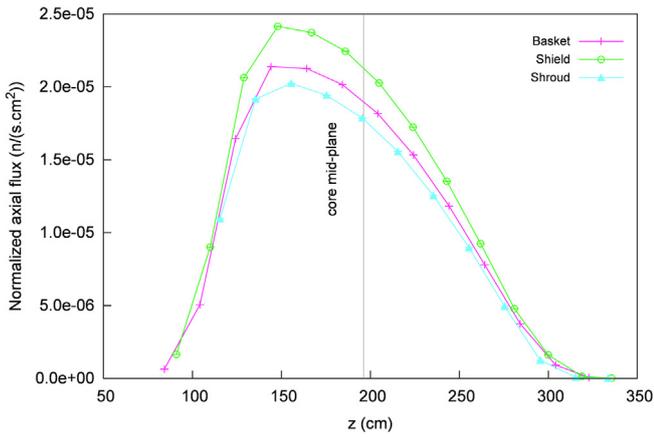


Fig. 4. Axial flux obtained with a 1 n/s neutron fission source and for the more massive structures of the reactor: the shield, the basket and the shroud in green, magenta and cyan, respectively. The axial position of the core mid-plane is also reported in gray. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

tilted towards the fuel bottom. The maximum is obtained for $z = 150$ cm, thus -46.24 cm from the core mid-plane.

In Fig. 5 are reported the flux maps obtained for the lower structures, namely the support plate and the lower grid. The 4 angular meshes and the 3 radial meshes are visible for each structure. Due to its position near the core the support plate presents a radial flux gradient with higher values obtained at the center of the plate. Even if the lower grid presents a quite homogeneous distribution of the flux, the lower grid presents also a radial flux gradient but radial flux obtained for lower grid is 10 to 100 smaller and cannot be observed with the color scale of Fig. 5.

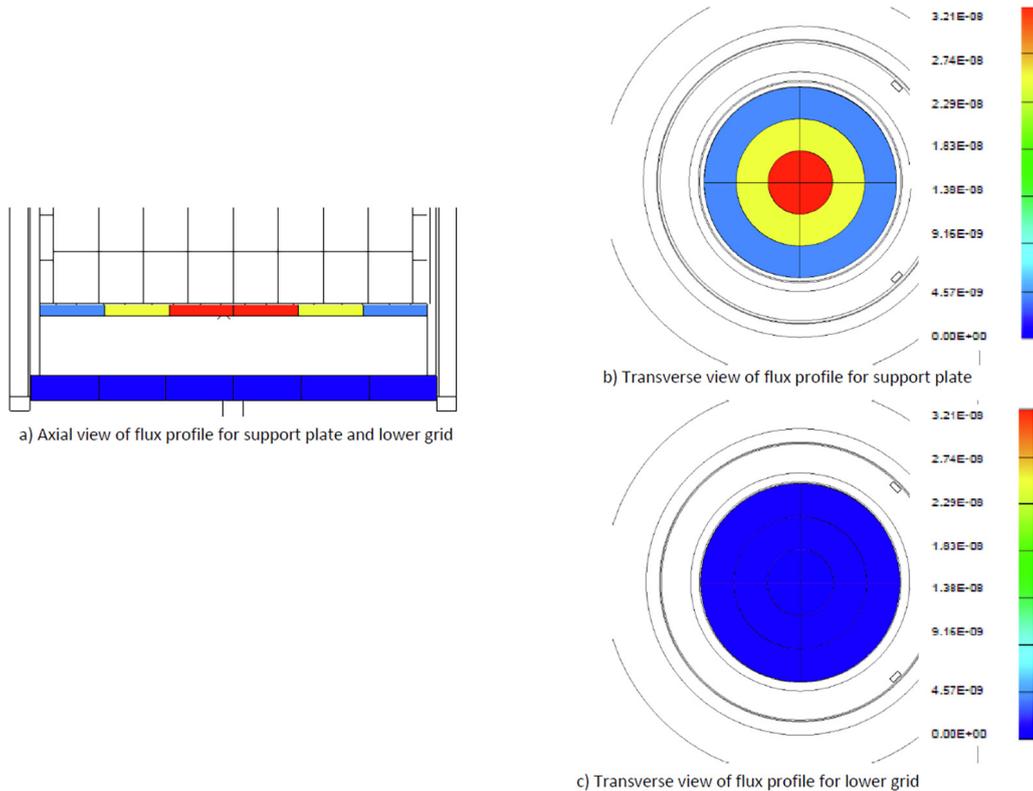


Fig. 5. Transverse flux obtained with a 1 n/s neutron fission source for the support plate (b) and the lower grid (c).

5.2. Activation of the structures of interest

Results obtained with the reference configuration are reported in Table 3. Activity values have been normalized for a source intensity of 1 n/s. Only isotopes contributing to more than 0.01% are listed. The global activity is about 3.10×10^{-5} Bq. The main contributors are ^{63}Ni (85%), ^{60}Co (10%) and ^{93m}Nb (3%). The most activated structure is the shroud (65%). The shield and support plate represent together 28% of the global activity.

5.3. Impact of modeling parameters

5.3.1. Control rods position

The global activity is 3.10×10^{-5} Bq, 3.14×10^{-5} Bq and 3.19×10^{-5} Bq when control rods are positioned at 35 cm, 120 cm from fuel bottom and FCH location, respectively. Control rods rising induces thus a small increase of global activity of about 3%.

In Table 4 the contribution of structures and radionuclides to the global activity is detailed. We can note that shroud and basket contributions increase and support plate and lower grid contributions decrease when control rods rise. This result is consistent with the reactor geometry because support plate and lower grid are localized near fuel bottom. During control rods rising, neutron fluence rate is no more pushed to fuel bottom and distributed along the entire height of the shroud.

Activity distributions reported in Fig. 6 (c),d) and e) panels) confirm also this trend. On panel c) of this figure we can also note a specific behavior of main grid activity. This one is indeed the lowest when control rods are localized 120 cm above fuel bottom and not when all control rods are up. Activity distributions obtained for “axial structures” (shield and basket) are also reported in panels a) and b). We can observe a cosine profile of the axial distribution

Table 3
Activation of the main structures. Only radionuclides with a contribution higher than 0.01% are listed.

Radionuclides	Structure activation (Bq) for a neutron source intensity of 1 n/s.						Total	Contribution (%)
	Shroud	Shield	Basket	Main grid	Support plate	Lower grid		
⁵⁵ Fe	1.12×10^{-07}	2.49×10^{-08}	6.85×10^{-09}	2.53×10^{-11}	1.92×10^{-08}	2.09×10^{-09}	1.66×10^{-07}	0.535
⁶⁰ Co	2.36×10^{-06}	2.60×10^{-07}	1.18×10^{-07}	3.86×10^{-10}	3.58×10^{-07}	2.52×10^{-08}	3.12×10^{-06}	10.09
⁵⁹ Ni	1.72×10^{-07}	5.24×10^{-08}	1.44×10^{-08}	4.16×10^{-11}	2.97×10^{-08}	3.51×10^{-09}	2.72×10^{-07}	0.882
⁶³ Ni	1.68×10^{-05}	5.02×10^{-06}	1.34×10^{-06}	3.97×10^{-09}	2.91×10^{-06}	3.35×10^{-07}	2.64×10^{-05}	85.34
^{93m} Nb	7.39×10^{-07}	5.26×10^{-08}	5.45×10^{-08}	5.75×10^{-11}	7.43×10^{-08}	5.24×10^{-09}	9.26×10^{-07}	2.996
⁹³ Mo	9.27×10^{-09}	6.16×10^{-10}	6.03×10^{-10}	5.02×10^{-13}	1.11×10^{-09}	5.38×10^{-11}	1.17×10^{-08}	0.038
⁹⁴ Nb	2.48×10^{-08}	3.49×10^{-09}	2.15×10^{-09}	2.44×10^{-12}	3.43×10^{-09}	2.34×10^{-10}	3.41×10^{-08}	0.110
⁹⁹ Tc	1.48×10^{-09}	1.11×10^{-10}	1.06×10^{-10}	8.20×10^{-14}	1.92×10^{-10}	9.02×10^{-12}	1.90×10^{-09}	0.006
Total	2.02×10^{-05}	5.41×10^{-06}	1.53×10^{-06}	4.48×10^{-09}	3.39×10^{-06}	3.71×10^{-07}	3.10×10^{-05}	0.110
Contribution (%)	65.32	17.52	4.96	0.014	10.98	1.20		

Table 4
Impact of control rods position on structures and radionuclides contributions to the global activity.

Control rods position	35 cm	120 cm	FCH
<i>Structures contribution (%)</i>			
Shroud	65.79	68.27	71.10
Shield	17.34	18.25	18.21
Basket	5.003	5.148	5.119
Main Grid	0.0136	0.0069	0.0201
Support Plate	10.67	7.519	5.025
Lower Grid	1.181	0.8099	0.5326
<i>Radionuclides contribution (%)</i>			
⁵⁵ Fe	0.5444	0.5353	0.5351
⁶⁰ Co	8.550	10.07	10.01
⁵⁹ Ni	0.9010	0.8764	0.8804
⁶³ Ni	86.14	85.32	85.43
^{93m} Nb	3.676	3.045	2.989
⁹³ Mo	0.0455	0.0380	0.0372
⁹⁴ Nb	0.1349	0.1107	0.1089
⁹⁹ Tc	0.0073	0.0062	0.0060

when control rods are positioned at 120 cm above the fuel bottom. For the two other extreme positions the distributions are tilted towards low (for the 35 cm position) or up (for FCH position) axial positions.

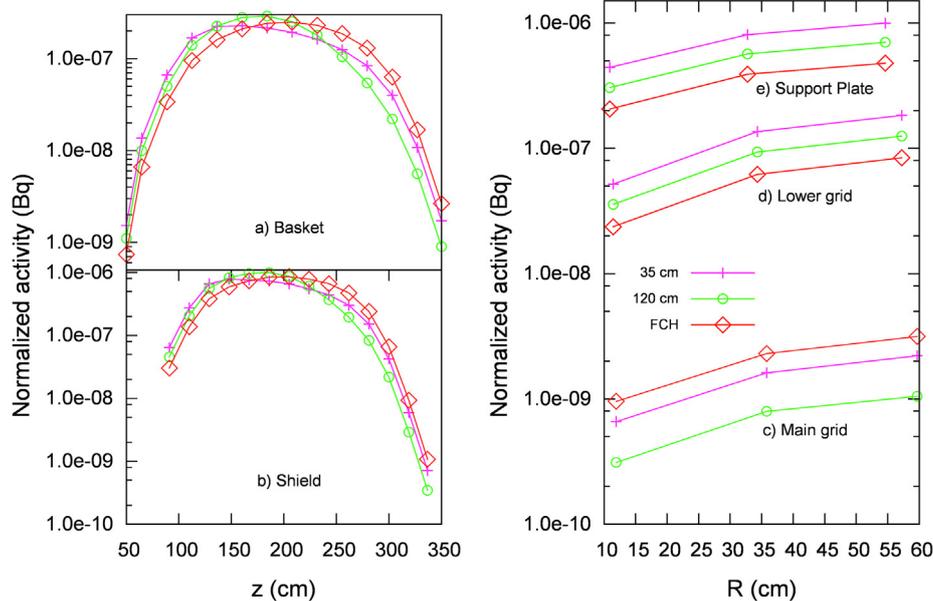


Fig. 6. Impact of control rods position on axial and radial activity distribution for basket (a) panel), shield (b) panel), support plate (e) panel) and grids (c) and d) panels). Activity of structures is reported for a 1 n/s fission neutron source.

Contribution of ⁶⁰Co increases about 17% whereas contributions of ^{93m}Nb, ⁹³Mo, ⁹⁴Nb and ⁹⁹Tc decrease about 20% during control rods rising. Moreover, during control rods rising, concentration of each isotope increases for the shroud and the main grid whereas it decreases for the other structures located in the lower part of the reactor (lower grid, support plate). It is quite constant for shield and basket. This difference in the variation of the isotope concentration can be explained by a non-uniformity of ⁵⁹Co and other isotopes in the composition of the different structures.

5.3.2. Boron concentration

In Table 5 are reported the ratio of the activation levels obtained without (A_{0ppm}) and with boron (A_{500ppm}). The impact of boron concentration is relatively weak: about 5% for the whole structures. The impact on support plate and lower grid is larger: about 10% increase.

5.3.3. Impurities sensitivity

The sensitivity factors obtained for the five configurations previously detailed in paragraph 4.2.3 are reported in Table 6.

Variation of cobalt level in the shroud and the basket only affects ⁶⁰Co activity. Variation of niobium level in shield, shroud and basket affects ⁹²Nb, ^{93m}Nb, ⁹³Zr and ⁹⁴Nb activities because of

Table 5Comparison (A_{0ppm}/A_{500ppm}) of activation levels obtained for 2 values of boron concentration with control rods positioned at FCH location.

	Shroud	Shield	Basket	Main Grid	Support Plate	Lower Grid	Total
⁵⁵ Fe	1.05	1.05	1.05	1.07	1.12	1.11	1.06
⁶⁰ Co	1.05	1.05	1.05	1.09	1.11	1.11	1.05
⁵⁹ Ni	1.05	1.05	1.05	1.07	1.12	1.11	1.05
⁶³ Ni	1.05	1.05	1.05	1.07	1.12	1.11	1.06
^{93m} Nb	1.06	1.05	1.05	1.06	1.11	1.09	1.06
⁹³ Mo	1.05	1.05	1.05	1.06	1.11	1.11	1.06
⁹⁴ Nb	1.05	1.05	1.05	1.06	1.11	1.12	1.05
⁹⁹ Tc	1.05	1.05	1.05	0.97	1.11	1.14	1.05
Total	1.05	1.05	1.05	1.07	1.12	1.11	1.06

Table 6

Structures activation sensitivities (S) calculated for several cobalt and nickel impurities levels.

	Shield	Shroud		Basket	
	Nb variation from 0.613 to 0.8%	Co variation from 0.061 to 0.07%	Nb variation from 0.613 to 0.8%	Co variation from 0.045 to 0.059%	Nb variation from 0.623 to 0.81%
⁶⁰ Co	0.00	0.97	0.04	1.05	0.01
⁹¹ Nb	0.02	0.00	0.01	0.07	0.09
⁹² Nb	0.61	0.01	0.50	0.04	0.68
^{93m} Nb	0.99	0.00	0.99	0.08	0.97
⁹³ Zr	0.84	0.01	0.83	0.06	0.86
⁹⁴ Nb	1.00	0.00	0.99	0.07	0.98
Total	0.01	0.11	0.03	0.15	0.04

the reactions involved in the formation of these radionuclides: $^{93}\text{Nb}(n, 2n)^{92}\text{Nb}$, $^{93}\text{Nb}(n, n\gamma)^{93m}\text{Nb}$, $^{93}\text{Nb}(n, p)^{93}\text{Zr}$, $^{93}\text{Nb}(n, \gamma)^{94}\text{Nb}$. This sensitivity study is particularly interesting in the case of ^{94}Nb because the quantity of this ^{93}Nb in the steel (1 ppm) and its massic activity (120 Bq/g) can limit the transfer of related steels to the French dedicated storage center (CSFMA for Storage center of small and moderate activities or Centre de Stockage des Faibles et Moyennes Activités in French).

In the case of the present study we have compared the results obtained with the reference configuration to the maximum acceptance limits of the CSFMA. These ones are exceeded for:

- ^{59}Ni and ^{63}Ni for basket and support plate structures,
- ^{94}Nb for shield, shroud, support plate and lower grid structures.

The associated nuclear waste will thus have to be stored until the activity reaches the maximum acceptance limits of the CSFMA.

5.4. Influence of activation library

In Table 7 are reported the ratio of activity values obtained with the JEFF 3.1.1 library ($A_{\text{JEFF3.1.1}}$) and with the EAF-2001 library (A_{EAF01}). The values vary between 0.990 and 1.095 which indicate a deviation between –1% and 9.5%. We can note that the larger differences are observed for ^{93m}Nb . We can thus use COMAC library

Table 7Comparison ($A_{\text{JEFF3.1.1}}/A_{\text{EAF01}}$) of activation levels obtained with JEFF 3.1.1 and EAF-2001 libraries.

	Shield	Basket	Main Grid	Support Plate	Lower Grid
⁵⁵ Fe	1.007	1.008	1.009	1.008	1.009
⁶⁰ Co	0.999	1.000	1.000	1.000	1.000
⁵⁹ Ni	0.998	0.999	1.000	1.000	1.000
⁶³ Ni	0.990	1.008	0.990	1.004	0.992
^{93m} Nb	1.093	1.095	1.095	1.095	1.095
⁹³ Mo	0.998	0.999	1.000	1.000	1.000
⁹⁴ Nb	0.998	1.000	1.000	1.000	1.000
⁹⁹ Tc	0.999	1.000	1.000	1.000	1.000
Total	0.992	1.010	0.993	1.005	0.994

with the reference calculation results to determine uncertainties on decay constant, branching ratio and effective cross-sections. However a special attention has to be paid for results concerning ^{93m}Nb .

5.5. Impact of modeling biases

In Table 8 results obtained with 172 energy groups are compared with reference activity levels obtained with 315 energy groups. We can note an underestimation varying between 15 and 20% when the 172 energy mesh is used, mainly due to the impact of the mesh on the activation of ^{59}Co and ^{62}Ni .

The ratio of activity obtained without intermediate cycles ($A_{\text{without_intermediate_cycles}}$) and with intermediate cycles ($A_{\text{with_intermediate_cycles}}$) intermediate cooling cycles in the operating history are reported in Table 9.

Consideration or negligence of intermediate cooling cycles has a weak impact on the global activity (less than 5%). In contrast, negligence of intermediate cycles on the operating history leads to an increase of ^{60}Co and ^{93m}Nb activity level of about 24% and 9%, respectively. These results are consistent with the half live time of both radionuclides, thus 5 years for ^{60}Co and 16 years for ^{93m}Nb .

The ratio of activity obtained with the simple or the detailed discretization of the last cycle ($A_{\text{Simple_Last_Cycle}}$ or $A_{\text{Detailed_Last_Cycle}}$) and with the initial last cycle burnup ($A_{\text{Initial_Last_cycles}}$) are reported

Table 8
Comparison (A_{172g}/A_{315g}) of activation levels obtained for 2 energy meshes.

	Shroud	Shield	Basket	Main Grid	Support Plate	Lower Grid
⁵⁵ Fe	0.87	0.85	0.87	0.81	0.84	0.84
⁶⁰ Co	0.71	0.78	0.70	0.76	0.72	0.78
⁵⁹ Ni	0.88	0.85	0.87	0.80	0.84	0.84
⁶³ Ni	0.87	0.84	0.86	0.80	0.83	0.84
^{93m} Nb	1.05	1.04	1.04	1.02	1.04	1.03
⁹³ Mo	1.03	1.00	1.02	1.02	1.05	1.00
⁹⁴ Nb	1.06	0.96	1.05	0.91	1.02	0.96
⁹⁹ Tc	1.02	1.00	1.01	1.02	1.02	0.99
Total	0.86	0.84	0.86	0.80	0.83	0.84

Table 9
Comparison ($A_{without_intermediate_levels}/A_{with_intermediate_levels}$) of activation levels obtained without and with intermediate levels in the operating history.

	Shroud	Shield	Basket	Main Grid	Support Plate	Lower Grid	Total
⁵⁵ Fe	1.338	1.333	1.338	1.338	1.338	1.338	1.337
⁶⁰ Co	1.239	1.233	1.238	1.237	1.241	1.238	1.239
⁵⁹ Ni	1.000	0.996	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999
⁶³ Ni	1.015	1.011	1.015	1.015	1.015	1.015	1.014
^{93m} Nb	1.088	1.085	1.088	1.088	1.088	1.088	1.088
⁹³ Mo	1.000	0.997	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
⁹⁴ Nb	1.000	0.997	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
⁹⁹ Tc	1.000	0.997	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Total	1.045	1.024	1.034	1.036	1.040	1.032	1.039

Table 10
Comparison of activation levels obtained for the support plate and the shield by discretizing the last operating cycle. The results obtained with both discretization, Simple ($A_{Simple_Last_Cycle}/A_{Initial_Last_cycles}$) or Detailed ($A_{Detailed_Last_Cycle}/A_{Initial_Last_cycles}$), are presented.

	Support Plate	
	$A_{Simple_Last_Cycle}/A_{Initial_Last_cycles}$	$A_{Detailed_Last_Cycle}/A_{Initial_Last_cycles}$
⁵⁵ Fe	1.049	1.042
⁶⁰ Co	1.019	1.015
⁵⁹ Ni	1.000	1.000
⁶³ Ni	1.000	1.000
^{93m} Nb	1.005	1.005
⁹³ Mo	1.000	1.000
⁹⁴ Nb	1.000	1.000
⁹⁹ Tc	1.000	1.000
	Shield	
⁵⁵ Fe		1.039
⁶⁰ Co		1.016
⁵⁹ Ni		1.000
⁶³ Ni		1.000
^{93m} Nb		1.005
⁹³ Mo		1.000
⁹⁴ Nb		1.000
⁹⁹ Tc		1.000

Table 11
Activity uncertainties (in %) induced by ND uncertainties in activation reactions.

	Shroud	Shield	Basket	Main Grid	Support Plate	Lower Grid	Contribution (%)
⁵⁵ Fe	7.271	7.349	7.302	7.330	7.303	7.342	0.539
⁶⁰ Co	0.855	0.677	0.770	0.682	0.793	0.678	9.803
⁵⁹ Ni	7.346	7.416	7.382	7.416	7.369	7.415	0.882
⁶³ Ni	10.97	11.44	10.79	10.40	10.13	11.51	85.87
^{93m} Nb	0.526	0.519	0.516	0.509	0.539	0.513	2.758
⁹³ Mo	20.53	20.44	20.46	20.47	20.43	20.55	0.035
⁹⁴ Nb	12.31	12.31	12.31	12.31	12.31	12.31	0.105
⁹⁹ Tc	4.240	4.177	4.238	4.168	4.271	4.172	0.006

in Table 10 for the support plate and the shield. We can note that both discretizations have impact only for radionuclides with short half-lives: ⁵⁵Fe (2.741 years), ⁶⁰Co (5.271 years) and ^{93m}Nb (16.12 years). The effect is quite low in our study (less than 5%). However, as the effect depends mainly on irradiation time, decay time and radionuclides half-life the effect could be more significant for other reactors and has to be taken into account.

5.6. Determination of uncertainty due to nuclear data in the activation reaction

Uncertainty values obtained with IncerD are reported in Table 11.

Among the main radionuclides, we can note a high uncertainty value (larger than 10%) for ⁶³Ni and ⁹⁴Nb. The origin of this value is detailed in Fig. 7 for the particular case of the basket structure.

Uncertainty in ND is mainly due to the decay constant. For instance, in the case of ⁹¹Nb and ⁹³Mo, decay constant contributes to more than 15% to the global uncertainty. However, these radionuclides have a little role in the global activity and these values scarcely alter the global uncertainty.

We can also note a high uncertainty on the decay constant of ⁹⁴Nb. Although this radionuclide participates poorly to the global activity, its case has to be studied in details because its massic

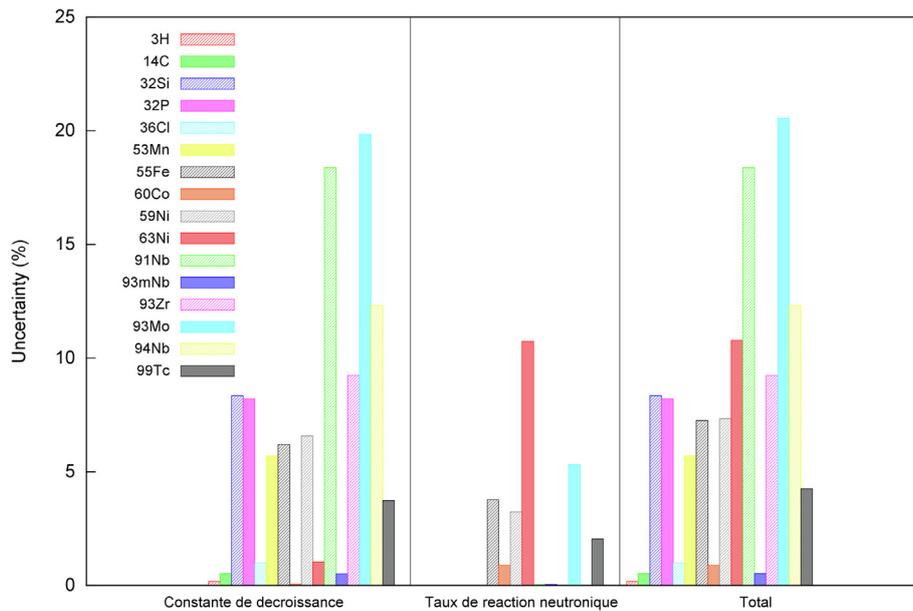


Fig. 7. Radionuclide contribution of each parameter to the global uncertainty in the particular case of the basket structure.

activity is a limiting factor for the transfer of nuclear waste to the CSFMA.

By contrast, in the formation of ⁶³Ni, uncertainty is mainly due to the reaction rate. This radionuclide contributes to more than 80% of the global activity and such an uncertainty on the reaction rate is thus not negligible.

6. Conclusions

DEMMAIN package allows the estimation of structures activation in nuclear reactors thanks to:

- a deterministic modeling of the reactor core with the core initial parameters;
- a coupling with the MC simulation of neutrons and the 315 energy groups estimation of flux in the structures of interest,
- an activity calculation with DARWIN package of the different structures by taking into account the full history of the reactor.

These results obtained with the reference case should be provided together with results issued from impact assessment studies (Table 12):

- Control rods position induces a global overestimation of about 3% for FCH position compared to reference calculation.
- Boron concentration induces a global overestimation of about 6% for 0 ppm compared to reference calculation.
- Impurities concentrations induce between 17 and 33% of uncertainty, depending on the radionuclide; in this study the maximal variations of Nb and Co concentrations are 33 and 17%

respectively, which lead to the following radionuclides uncertainties: 33% for ⁹⁴Nb, 20% for ⁹²Nb, 32% for ^{93m}Nb, 28% for ⁹³Zr and 17% for ⁶⁰Co.

- ND uncertainties lead to an activity uncertainty varying between 0.9 and 12.3% depending on the radionuclide.

A radar chart could be a useful tool to compare the impact of the different parameters. For example, in Fig. 8, the impact of each parameter on the shroud activity is reported for the 3 main isotopes that contribute to the activation of the structure. We can easily note that the “star” obtained for ⁶⁰Co is more distorted than the 2 other ones. ⁶⁰Co is thus more sensitive to the modeling factors studied here than ⁶³Ni and ^{93m}Nb. These values shall however be regarded merely as indicative to judge of the activity variation to each parameter independently. Some correlations exist between parameters (control rod position and boron concentration for example) and the estimation of a global corrective factor need the development of a specific methodology.

We can however highlight two groups of structures:

- the massive structures (shroud, shield and basket) are little sensitive to the variation of the initial parameters because of their height and non localized effect;
- the structures positioned axially on both sides of the reactor core (main and lower grids and support plate) are more sensitive and some corrective factors need to be applied to their activity estimation to be conservative.

The study of the different factors reported in Table 12 lead also to the following recommendations:

Table 12

Impact of the different parameters affecting activation estimation in the case of dismantling reactors.

Uncertain parameter	Shroud	Shield	Basket	Main grid	Support plate	Lower grid	Total
Impact of control rods position	+12%	+7%	+6%	+43%	-53%	-54%	+3%
Impact of boron concentration	+5%	+5%	+5%	+7%	+12%	+11%	+6%
Impact of impurity levels	Between 17 and 33% according to the radionuclide						
Impact of ND uncertainties	Between 0.9 and 12.3% according to the radionuclide						

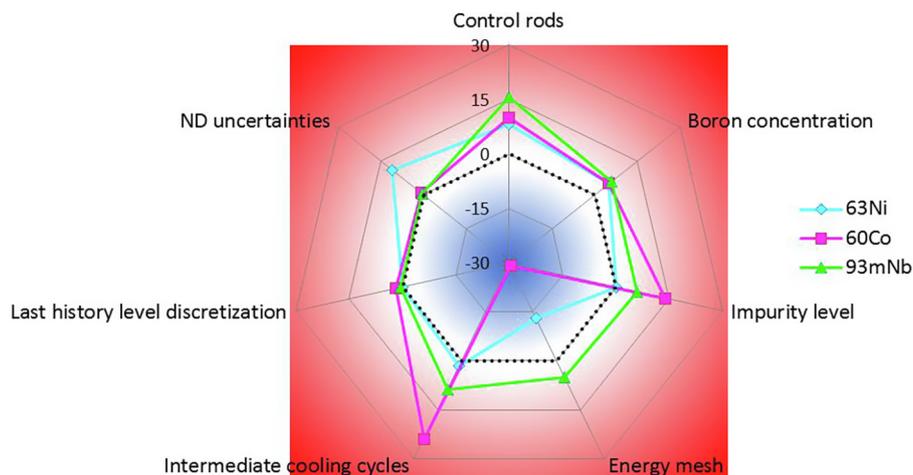


Fig. 8. Radar chart representing the impact of the different factors in percentage on the shroud activity for the 3 main contributors (^{63}Ni , ^{60}Co and $^{93\text{m}}\text{Nb}$).

- A calculation performed when all the control rods are up do not lead systematically to conservative results for all the structures. To obtain an activity level representative of the reactor life, it might be more advisable to use a mean control rod position.
- A calculation performed without soluble boron leads to conservative results. Thus, according to the final aim of the study (imposition of surveillance or estimation of waste quantity), a computation without soluble boron or with a representative boron concentration might be considered.
- Negligence of intermediate cooling cycles in the operating history leads to a conservative estimation of activity levels for some radionuclides, according to their half life time and to the reactor operating history.
- In order to obtain conservative estimation of activation levels an integrated burnup value for the last history step is not enough: the last history step has to be described precisely, especially for radionuclides with half lives close to the irradiation time.

This study needs to be continued to explain the high sensitivity of structures localized on both sides of the core (main and lower grids, support plate). Moreover, this study has been performed with a new core. The fuel evolution is not taken into account in this study. To determine the impact of this factor, APOLLO2 calculations should be performed to get depleted SAPHYBs which should then be used in CRONOS2 to get the evolved fuel composition and sources distribution.

Acknowledgments

The authors would like to express their appreciation to Guillaume Truchet, Maxence Maillot, Bernard Gastaldi, Julien Politello for their respective help in the use of APOLLO2 and CRONOS2 and Loic Laffond and Baptiste Benezech for input data on the modeled nuclear facility.

Appendix A. Supplementary data

Supplementary data associated with this article can be found, in the online version, at <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.05.054>.

References

- Archier, P., et al., 2015. COMAC nuclear data covariance matrices library for reactor applications. JAEA-Conf-2014-003 – Tada, Kenichi Chiba, Go, Chiba, Go, & Yamamoto, Akio (Eds.), Japan.
- Autorité de Sûreté Nucléaire, 2017. Qualification des outils de calcul scientifique utilisés dans la démonstration de sûreté nucléaire. Guide de l'ASN No 28..
- Avramova, M., Ivanov, K., 2010. Verification, validation and uncertainty qualification in multi-physics modelling for nuclear reactor design and safety analysis. *Prog. Nucl. Energy* 52, 602–614.
- Boden, S., Rogiers, B., Jacques, D., 2013. Determination of ^{137}Cs contamination depth distribution in building structures using geostatistical modeling of isocs measurements. *Appl. Radiat. Isot.* 79, 25–36.
- Briesmeister, J.F., 2000. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 4C. LA-13709-M. Los Alamos National Laboratory.
- Brun, E. et al., 2015. TRIPOLI-4 CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code. *Ann. Nucl. Energy* 82, 151–160. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.07.053>.
- Cho, D.K. et al., 2012. Source term characterization program for the decommissioning waste from a CANDU reactor. *Prog. Nucl. Energy* 55, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2011.09.011>.
- Faure, B. et al., 2018. Neutronic calculation of an axially heterogeneous ASTRID fuel assembly with APOLLO3: analysis of biases and foreseen improvements. *Ann. Nucl. Energy* 115, 88–104.
- Forrest, R.A., 2001. The European Activation File EAF-2001 decay data library. UKAEA-FUS-452..
- French Parliament (National Law), 2012. Order of 7 february 2012 setting the general rules relative to basic nuclear installations (English version)..
- Hfaiedh, N., Santamarina, A., 2005. Determination of the Optimized Shem Mesh for Neutron Transport Calculations. M and C 2005: International Topical Meeting on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications. SFEN, France.
- Judge, S.M., Regan, P.H., 2017. Radionuclide metrology research for nuclear site decommissioning. *Radiat. Phys. Chem.* 140, 463–465. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.02.027>.
- Kontogeorgakos, D., Tzika, F., Stamatelatos, E., 2011. Neutron activation study of the GRR-1 research reactor core supporting plate. *Radiat. Transp. Prot.* 175, 435–444. <https://doi.org/10.13182/NT175-435>.
- Lautard, J.J., et al., 1990. CRONOS: a modular computational system for neutronic core calculations. IAEA Specialists Meeting on Advanced Calculation Methods for Power Reactors, Cadarache, France, Sept. 10–14, 1990..
- Le Loirec, C., Soulard, M., Ritter, G., Penelieu, Y., 2018. Benchmark study of TRIPOLI-4 for decommissioning purposes. DEM 2018 – International Conference on Dismantling Challenges: Industrial Reality, Prospects and Feedback Experience..
- NEA Data Bank Computer Program, 2002. ORIGEN2. 2: Isotope Generation and Depletion Code, Matrix Exponential Method. Document CCC-0371. Ridge National Laboratory, Oak.
- Ouzounian, G., Voinis, S., Boissier, F., 2012. Radioactive waste management in France: safety demonstration fundamentals. *Ann. ICRP* 14, 286–293.
- Rodenas, J., 2017. Application of the Monte Carlo method to estimate doses due to neutron activation of different materials in a nuclear reactor. *Radiat. Phys. Chem.* 140, 442–446. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.02.015>.
- Lahaye, S., Huynh, T.D., Tsilanizara, A., 2016. Comparison of deterministic and stochastic approaches for isotopic concentration and decay heat uncertainty quantification on elementary fission pulse. EPJ Web of Conferences 111, 09002.
- San Felice, L. et al., 2013. Experimental validation of the DARWIN 2.3 package for fuel cycle applications. *Nucl. Technol.* 184, 217–232. <https://doi.org/10.13182/NT12-121>.

- Sanchez, R. et al., 2010. APOLLO2 YEAR 2010. *Nucl. Eng. Technol.* 42, 474–499.
- Santamarina, A., et al., 2009. The JEFF-3.1.1 nuclear data library. JEFF Report 22, NEA No. 6807.
- Schlomer, L., Philippen, P.W., Lukas, B., 2017. Activation calculation for the dismantling and decommissioning of a light water reactor using MCNPwith ADVANTG and ORIGEN-S. *EPJ Web Conf.* 153, 05020.
- Soulard, M., Ritter, G., Le Loirec, C., Eschbach, R., Serot, O., 2018. Source term computation for reactor dismantling operations: Application to CEA PHEBUS facility. DEM 2018 – International Conference on Dismantling Challenges: Industrial Reality, Prospects and Feedback Experience.
- Takeishi, T. et al., 2018. Disposal procedure for contaminated surface of tritium handling facility in the decommissioning operation. *Fusion Eng. Des.* 128, 231–234.
- Tsilanizara, A. et al., 2000. DARWIN: an evolution code system for a large range of applications. *J. Nucl. Sci. Technol.* 37, 845–849. <https://doi.org/10.1080/00223131.2000.10875009>.
- Vaglio-Gaudard, C. et al., 2013. Analysis of the AMMON experimental program in the EOLE facility supporting the qualification of the JHR neutron and photon tools. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 61, 1–9. <https://doi.org/10.1109/ANIMMA.2013.6727887>.
- Wattez, T., Duhart-Barone, A., Lorente, S., 2015. Tritium through-diffusion test in non steady state: can the effective diffusion coefficient be determined? *Constr. Build. Mater.* 93, 121–129.

Conclusion

Au cours de mes activités de R&D, les études et développements dont j'ai eu la charge se sont portés principalement sur l'utilisation de la simulation Monte Carlo dans le domaine de la dosimétrie, avec des applications dans le milieu médical et nucléaire.

Dans le milieu médical, la notion de dose est historiquement portée par les médecins travaillant dans les services de radiothérapie. Ces derniers sont en effet garants de la dose délivrée au patient. Bien qu'étant une observable physique, la dose est également, de par les interactions induites par les particules sur le volume tumoral, l'agent thérapeutique utilisé par les radiothérapeutes pour traiter les patients. Elle se doit donc d'être estimée au préalable à l'aide d'outils de plus en plus précis et complexes : les TPS. Ces stations de planification embarquent en leur sein des algorithmes de calcul de dose basés de plus en plus sur les techniques Monte Carlo pour fournir au milieu clinique une estimation de plus en plus fiable de la dose et une distribution spatiale de plus en plus optimale.

On constate ces dernières décennies que le concept de TPS sort des services de radiothérapie pour s'imposer petit à petit dans les services d'imagerie.

La première spécialité à s'être dotée de tels outils et méthodes est la médecine nucléaire. La médecine nucléaire a cette spécificité qu'elle peut être utilisée à des fins diagnostiques, à l'aide de l'imagerie fonctionnelle, mais également à des fins thérapeutiques, l'injection de radiopharmaceutiques spécifiques permettant en effet le traitement local de certaines tumeurs. C'est dans ce contexte thérapeutique que des approches analytiques, dont le formalisme du MIRD, ont été développées afin d'estimer la distribution 3D des doses absorbées aux organes et tissus. Tout comme en radiothérapie, ces approches analytiques présentent des limitations auxquelles la SMC peut apporter des solutions. Elle permet de prendre en compte la géométrie réelle du patient avec ses hétérogénéités, et peut donc estimer la distribution réelle d'un radiopharmaceutique dans le corps d'un patient. De par ses avantages, elle se révèle donc un outil puissant permettant l'optimisation de procédures thérapeutiques mais également diagnostiques.

Dans le domaine du diagnostic pur, l'utilisation massive du TDM pour diagnostiquer des maladies ou estimer la performance de certains traitements, a conduit à des questionnements d'ordre sanitaire sur le niveau de dose délivré au patient, et tout particulièrement aux jeunes enfants. Bien que cette exposition soit **justifiée** par des raisons médicales, elle se doit également d'être **optimisée** afin de respecter le principe ALARA. Une personnalisation des protocoles s'est donc mise en oeuvre dans les services d'imagerie avec, dans un premier temps, l'utilisation d'indices dosimétriques tels que le CTDI ou le PDL. Ces indices, n'étant pas patient-spécifique et ne représentant que la quantité et la qualité de l'énergie émise par les tubes, sont de plus en plus remplacés par des outils plus complexes et précis basés sur des méthodes Monte Carlo.

Dans le domaine nucléaire, la grandeur d'intérêt est le débit d'équivalent de dose (DED), soit une grandeur opérationnelle représentant un risque qu'il convient de limiter lors des analyses de sûreté. Etant donné les géométries mises en oeuvre dans les réacteurs, une estimation précise du DED en chaque point est complexe. C'est pourquoi des méthodes simplifiées, telles que celles du noyau ponctuel avec atténuation en ligne droite (PKI¹), sont souvent mises en oeuvre, en particulier dans des outils de réalité virtuelle utilisés pour planifier les opérations de démantèlement et de maintenance. Néanmoins, le domaine de validité de ces méthodes est limité, en raison des hypothèses mêmes sur lesquelles elles sont fondées. Ainsi, dans des configurations de type *bunker* où différents phénomènes physiques entrent en jeu de façon simultanée, le résultat obtenu n'est pas fiable et difficilement utilisable. On fait alors appel à la SMC associée à des techniques de réduction de la variance assez complexes.

Bien que très différentes de par leurs enjeux, les applications médicales et énergétiques des rayonnements ionisants se rejoignent sur l'aspect de la dosimétrie. En médecine, l'exposition aux rayonnements ionisants est justifiée et elle se doit d'être optimisée alors que dans le milieu des réacteurs on cherche à la limiter. Néanmoins, une planification de la dose est toujours nécessaire afin d'estimer l'efficacité d'un traitement ou d'une protection. Un transfert de méthodologie entre ces deux domaines, que tout semble séparer, est donc possible.

Je présente ci-dessous les pistes de réflexion de transfert entre ces deux domaines me semblant pertinentes :

- **Du TPS médical vers les systèmes de management de l'information pour les réacteurs** L'objectif principal du TPS dans les services de radiothérapie est l'estimation de la dose au patient. Avec le développement des méthodes d'irradiation, de nouvelles exigences techniques et opérationnelles sont apparues pour ce "simulateur de la dose". Cet outil évite aujourd'hui les recopies fastidieuses et sujettes aux erreurs puisqu'il est intégré au sein d'un réseau informatique reliant les différentes données entre elles et les vérifiant. L'ergonomie avec laquelle les TPS sont développés permet l'intervention d'opérateurs de différentes disciplines (physiciens, manip-radio, médecins), chacun sur son domaine de compétences. Il fournit également une traçabilité du traitement des patients. Des systèmes de management de l'information du même ordre commencent à se développer dans le domaine du nucléaire, et tout particulièrement dans le domaine de l'A&D [130, 46]. De tels outils ont pour objectif d'assurer la sécurité et l'efficacité du démantèlement en enregistrant différentes données : planning, opérations, nature et suivi des déchets produits, L'A&D bénéficie en effet des nouvelles technologies disponibles aujourd'hui, contrairement aux réacteurs en fonctionnement, pour lesquels la technologie est restée telle qu'à la date de leur construction. Le développement de nouvelles filières de réacteurs est actuellement l'occasion de mettre en place ces systèmes de management de l'information, permettant un suivi complet de l'installation au cours de son fonctionnement mais également lors de son démantèlement. Dans tout projet d'A&D, la première étape consiste en effet à rechercher les informations sur la vie du réacteur : changement de coeur, changement de géométrie, paramètres de fonctionnement, historique de fonctionnement, éventuels incidents, ... Si toutes ces données sont d'ores et déjà disponibles au format numérique, elles seront plus fiables et seront plus facilement exploitables.

1. Point Kernel Integration

- **Vers une prise en compte des incertitudes en radiothérapie** Alors que le principe de VVQI est bien établi dans le milieu des OCS dédiés aux réacteurs, il l'est beaucoup moins dans le domaine médical. Lors de la réception d'un TPS, l'algorithme de dose est adapté au(x) LINAC(s) pour le(s)quel(s) il sera utilisé. Les données estimées *via* le TPS et obtenues expérimentalement sont comparées et éventuellement ajustées. Mais, malgré la complexité des plans de traitement actuels, aucune quantification des incertitudes n'est réalisée. Pourtant, la planification et la délivrance d'un traitement de radiothérapie doit faire face à de nombreuses sources d'incertitude :

- incertitude sur le positionnement du patient à l'aide des marqueurs externes,
- incertitude sur le positionnement du volume cible (tumeur principalement) due aux mouvements des organes entre les séances ou pendant la séance mais également due à la modification de l'allure du VC entre les séances (rétrécissement si le traitement est efficace par exemple),
- limites de l'algorithme de calcul de dose,
- incertitudes sur la délivrance du faisceau (positionnement des lames, du bras de l'accélérateur ...)

Quantifier l'impact de ces incertitudes sur un plan de traitement personnalisé est un gros challenge du point de vue temps de calcul. Goitein [131] a été l'un des premiers à aborder explicitement cette question dans un article de 1985, dans lequel il a quantifié la variabilité d'une distribution de dose en simulant trois scénarios de calcul de dose différents. Cependant ces simulations ne fournissent que des estimations ponctuelles d'une densité de probabilité et le "pire cas" dans l'espace des paramètres d'entrée ne correspond pas nécessairement au pire cas dans l'espace des indicateurs de qualité du plan de traitement.

Ainsi, malgré la complexité grandissante des plans de traitement, depuis des décennies, ces sources d'incertitudes sont traitées à l'aide de marges appliquées sur le volume cible. Des zones de l'anatomie du patient où le VC a peu de chances de se trouver reçoivent donc le même niveau de dose que les zones où la probabilité qu'il s'y trouve est plus importante. L'incorporation d'incertitudes dans le processus de planification pourrait donc ouvrir aujourd'hui la voie à des systèmes robustes [88] de planification des traitements.

- **Génération de modèles de sources : des LINAC vers les réacteurs** Comme nous avons pu le voir précédemment, la SMC est largement utilisée pour modéliser les interactions rayonnements-matière dans le domaine médical ainsi que dans le domaine nucléaire. Malgré ce grand attrait pour cette méthodologie, son implémentation dans des outils industriels, tels que les TPS en radiothérapie ou les simulateurs de RV dans l'A&D, reste à ce jour limitée. Ceci est du principalement à la difficulté de générer un modèle général et précis de source permettant à un utilisateur de déterminer les niveaux de dose pour une configuration donnée. Un modèle de source généralisée pouvant être adaptée à chaque cas de figure est nécessaire pour contre-balancer ces limites.

Classiquement, un modèle de source peut être obtenu en caractérisant cette dernière de façon analytique. Il est cependant difficile de représenter les corrélations entre les différents paramètres caractérisant les particules : énergie, position, direction de propagation, poids, Une caractérisation fine d'une source peut également être obtenue en utilisant une SMC complète des particules et en générant un espace des phases (PSFmc) au cours de la simulation. Dans les applications médicales, cette méthode est largement utilisée pour caractériser les faisceaux

des LINACs en radiothérapie [68] et des TDM en imagerie [69]. Dans les études dédiées aux réacteurs, cette fonctionnalité est plutôt déclinée pour les études de conception des détecteurs. Néanmoins, récemment, l'équipe d'UNED [70] a également utilisé cette méthode pour caractériser de façon synthétique la source de neutrons provenant du tokamak d'ITER et pour faciliter la détermination de l'ambiance radiologique après la protection biologique.

- **Hybridation des outils de simulation** Plusieurs méthodologies hybrides, dont le but est de combiner les avantages des simulations déterministes et stochastiques, ont été développées ces dernières années. Dans le contexte des interactions rayonnements-matière, on peut les diviser en deux groupes :

- Les méthodes basées sur la génération de CI^2 sont largement employées dans le domaine de la neutronique : elles emploient des algorithmes déterministes pour résoudre l'équation adjointe du transport et fournir des données avec une variance réduite au solveur Monte Carlo.

Une technique très populaire pour les SMC non-analogue est l'échantillonnage d'importance : l'idée est que certaines particules sont plus importantes que les autres car elles participent davantage au score demandé. Ainsi, en échantillonnant plus de particules dans une région importante de l'espace des phases, la convergence attendue sera meilleure. Afin de ne pas introduire de biais, le poids des particules doit être corrigé en conséquence. L'importance étant la contribution de la réponse du détecteur fournie par certaines particules dans l'espace des phases, dans le cas du transport des particules, cette quantité correspond au flux adjoint des particules. Plusieurs techniques d'accélération basées sur cette notion de flux adjoint ont été développées, la plus connue étant la famille des méthodes CADIS [75, 132, 133]. Ces algorithmes résolvent l'équation déterministe du transport à l'aide d'une approximation S_N [63] puis génèrent de façon automatique une CI qui est ensuite insérée dans la SMC. Cette méthode et des dérivées basées sur MCNP [134] ont démontré leur efficacité, en particulier dans le cas de calculs de protection [135, 136].

- Les méthodes basées sur la longueur du parcours des particules sont elles plutôt utilisées dans le domaine médical (imagerie et dosimétrie). Elles ont tout d'abord été proposées par Williamson en 1987 [76]. Cette nouvelle classe d'estimateur a été conçue à l'origine pour améliorer la SMC dans les milieux peu diffusants et a donc été largement utilisée dans le domaine médical. Elle est basée sur l'équivalence entre fluence des particules et longueur totale du trajet des photons par unité de volume. L'idée sous-jacente derrière cette équivalence est que toutes les particules qui traversent le volume d'intérêt contribuent au KERMA. Cet estimateur peut se présenter sous une forme linéaire ou exponentielle.

Cette méthodologie a été très vite mise en oeuvre dans le domaine de l'imagerie X où la diffusion dans l'objet/patient considéré contamine la détection du signal et conduit à un flou dans l'image. Dans l'approche proposé par Freud et *al* [23, 81], la formation de l'image est réalisée en deux temps : l'image primaire due aux particules n'ayant subi aucune collision est formée à l'aide d'un algorithme de ray-tracing ; dans une seconde simulation, une méthode hybride combinant SMC et algorithme de ray-tracing est mise

en oeuvre pour former l'image due aux particules secondaires. La méthode a été adaptée à la dosimétrie [24, 82]. La détection forcée a été abandonnée au profit d'une génération plus physique des particules secondaires. Ces dernières sont en effet produites par le module MC à l'aide des sections efficaces différentielles et un splitting est utilisé pour augmenter le nombre de particules secondaires. Ces particules secondaires sont ensuite suivies de façon déterministe. Cette technique connue sous le nom de `se_TLE` montre de bons résultats.

Une méthodologie similaire a été développée dans le domaine nucléaire par Sweezy [83] avec MonteRay. Il a développé un estimateur appelé Volumetric Ray Casting qui fonctionne comme celui de Smekens et *al*, à la différence que la partie déterministe est implémentée sur GPU.

Ces dernières années, je me suis focalisée sur deux de ces pistes de réflexion :

- La génération de modèles de sources dans le domaine nucléaire *via* l'encadrement de deux alternants

Nathan Hernandez (2017-2018) a développé un MSV basé sur les PSFmc générés par TRIPOLI-4® [73] représentant les paramètres des particules émises par un coeur de réacteur. Il a en particulier pris en compte la corrélation entre la position et l'énergie des particules.

Gaël Lemaniry (2019-2020) s'est de son côté focalisé sur le développement d'un MSV basé sur les fichiers de points de collision générés par TRIPOLI-4®. En effet, les PSFmc générés par TRIPOLI-4® ne fournissant pas d'informations sur les collisions des particules, il est nécessaire d'utiliser une autre fonctionnalité de TRIPOLI-4® pour obtenir ces informations. Le but de son travail est de permettre d'étendre le domaine de validité d'outils déterministes, tels que NARMER [66] utilisés dans le domaine de l'A&D pour estimer des DED.

- Le développement et l'estimation des performances d'un nouvel estimateur hybride dans le code Monte Carlo du CEA *via* la thèse d'Ettore Guadagni, dont les travaux ont été décrits au chapitre 9.

Dans les années à venir, j'envisage de poursuivre les travaux menés dans le cadre de cette thèse selon différentes voies :

- une transposition de l'estimateur au transport des neutrons pour étudier ses performances dans le domaine de la dosimétrie neutron en coeur et dans le domaine de l'activation des structures (estimation du flux neutronique) ; un sujet de thèse a été proposé pour poursuivre ces travaux ;
- une mise en application de la version actuelle, en particulier dans le domaine de la fusion, pour caractériser la nature des échauffements nucléaires au niveau des structures d'un réacteur ; le projet MODDIS a été proposé à l'appel du Programme Transversal de Compétences (PTC) du CEA. L'idée de cet appel à projet est d'encourager la transversalité au sein des équipes du CEA, en encourageant la mise en commun d'outils techniques et la synergie entre des unités provenant de directions différentes. L'idée directrice du PTC MODDIS est de mettre au point une méthodologie de calcul efficace basée sur l'hybridation de codes stochastiques et déterministes, pour accompagner, entre autres, le design des aimants supraconducteurs des bobines de champs toroïdal dans le domaine de la fusion. Pour cela, des simulations stochastiques, réalisées à l'aide du code Monte Carlo TRIPOLI-4® et de l'estimateur *e-TLE* seront utilisées pour caractériser la nature des échauffements nucléaires au niveau des aimants supraconducteurs d'un réacteur de fusion. Une base de données sera constituée afin d'obtenir

un modèle analytique des valeurs d'échauffement en fonction de divers paramètres tels que le rayon du boîtier qui contient les aimants, l'altitude, l'angle de position toroïdale,... Cette base de données pourra être *in fine* intégrée dans une plateforme d'aide au design des aimants supraconducteurs.

- un couplage de la version actuelle avec des outils plus opérationnels de réalité virtuelle ; cette voie de poursuite fait l'objet du projet AVALON proposé également à l'appel à projets du PTC. Nous nous proposons ici de combiner la précision des simulations Monte Carlo et la dynamique des plateformes de réalité étendue en changeant le paradigme calculatoire utilisé jusqu'à présent dans ces plateformes. Ainsi, plutôt que de s'orienter vers une estimation en ligne, rapide mais imprécise, voire erronée, du débit de dose, nous nous proposons de baser les estimations en ligne sur des données calculées hors-ligne. Cette démarche nécessite la construction d'une base de données Monte Carlo de cartes de débit de dose d'une installation, paramétrée pour un (ou plusieurs) scénario(i) donné(s). Une telle approche présente deux intérêts : (i) Par le biais de techniques d'apprentissage, elle permet la visualisation d'une carte de débit de dose précise et représentative de l'état radiologique d'une installation. Les zones inaccessibles aux opérateurs et nécessitant des moyens télé-opérés sont alors clairement identifiables. (ii) Par le biais de fichiers d'espace des phases, elle conduit à une optimisation locale non biaisée et en ligne des postes de travail. Pour cela, la base de cartes Monte Carlo doit être définie de manière à associer à chaque zone d'intervention une surface l'englobant. Les paramètres des particules traversant cette surface sont stockés dans un fichier d'espace des phases lors de la simulation Monte Carlo. De cette façon, à chaque zone d'opération, est définie une source paramétrée non biaisée issue de calculs Monte Carlo et prenant en compte les diverses interactions des particules avec le milieu environnant.

La mise en oeuvre de ces nouveaux projets me permettra de m'impliquer davantage dans le domaine spécifique de la neutronique et d'y développer des compétences nouvelles.

Références bibliographiques

- [1] The Guardian, “Apollo13 : celebrating the unsung heroes of mission control.” <https://www.theguardian.com/science/2017/apr/16/apollo-13-mission-control-unsung-heroes-jim-lovell-interview>, 2017.
- [2] ASN, “CONTROLE - Imagerie médicale : maîtriser les expositions aux rayonnements ionisants.” La Revue de l’ASN N°192, 2011.
- [3] M. Y. Y. Law and H. K. Huang, “Concept of a PACS and imaging informatics-based server for radiation therapy,” *Computerized Medical Imaging and Graphics*, vol. 27, pp. 1–9, 2003.
- [4] M. I. Munoz, F. Barcellini, and V. Mollo, “Produire la sécurité des soins en radiothérapie : supports à la coopération dans le collectif de travail,” in *Fiabilité, Adaptation et Résilience, SELF2010, Congrès International d’Ergonomie. Liège, Belgique. 295-300*, 2010.
- [5] M. Modrak and V. Modrak, “The effects of a PACS on Patient Radiation Doses and Operating Costs in Radiology Department : A Practical Study,” *Procedia Technology*, vol. 9, pp. 1282–1287, 2013.
- [6] M. Y. Y. Law and B. Liu, “Informatics in radiology - DICOM-RT and its utilization in radiation therapy,” *RadioGraphics*, vol. 29, pp. 655–667, 2009.
- [7] P. M. Bridge, R. M. Appleyard, J. W. Ward, R. Philips, and A. W. Beavis, “The development and evaluation of a virtual radiotherapy treatment machine using an immersive visualisation environment,” *Computer and Education*, vol. 49, pp. 481–494, 2007.
- [8] P. Bridge, S. B. Crowe, G. Gibson, N. J. Ellemor, C. Hargrave, and M. Carmichael, “A virtual radiation therapy workflow training simulation,” *Radiography*, vol. 22, pp. e59–e63, 2016.
- [9] A. W. Beavis and J. W. Ward, “The use of a virtual reality simulator to explore and understand the impact of Linac mis-calibrations,” *Journal of Physics : Conference Series*, vol. 489, p. 012086, 2014.
- [10] A. Boenjen and C. Grau, “Virtual reality in radiation therapy training,” *Surgical Oncology*, vol. 20, pp. 185–188, 2011.
- [11] Y. A. Jimenez and S. J. Lewis, “Radiation Therapy Patient Education Review and a Case Study Using the Virtual Environment for Radiotherapy Training System,” *Journal of Medical Imaging and Radiation Sciences*, vol. 49, pp. 106–117, 2018.
- [12] ASN, “Maîtrise des doses délivrées en imagerie médicale - Deuxième plan d’action ,” 2018.
- [13] IRSN, “Exposition de la population française aux rayonnements ionisants liée aux actes de diagnostic médical en 2012 - (Rapport PRP-HOM N°2014-6),” 2014.
- [14] AAPM, “Size-specific dose estimates (SSDE) in pediatric and adult body CT examinations AAPM Report No 204,” 2011.

- [15] S. Balter *et al.*, “Fluoroscopically guided interventional procedures : a review of radiation effects on patients’ skin and hair,” *Radiology*, vol. 254, pp. 326–341, 2010.
- [16] T. R. Koenig *et al.*, “Skin injuries from fluoroscopically guided procedures : part 2, review of 73 cases and recommendations for minimizing dose delivered to patient,” *AJR Am J Roentgenol*, vol. 177, pp. 13–20, 2001.
- [17] S. Jacob *et al.*, “Occupational Cataracts and Lens Opacities in interventional Cardiology (O’CLOC Study),” *Acta Ophthalmologica*, vol. 89, 2011.
- [18] J. Bott *et al.*, “virtX - evaluation of a computer-based training system for mobile C-arm systems in trauma and orthopedic surgery,” *Methods Inf Med*, vol. 47, pp. 270–278, 2008.
- [19] J. Bott *et al.*, “Informatics in radiology : use of a C-arm fluoroscopy simulator to support training in intraoperative radiography,” *Radiographics*, vol. 31, pp. E65–E75, 2011.
- [20] C. Le Loirec and C. Champion, “Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part I : The case of the allowed decay isotopes,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 582, pp. 644–653, 2007.
- [21] C. Le Loirec and C. Champion, “Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part II : The case of the radiometals,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 582, pp. 654–664, 2007.
- [22] C. Le Loirec and C. Champion, “Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part III : The case of the non-standard radionuclides,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 582, pp. 665–672, 2007.
- [23] N. Freud, J. M. Letang, C. Mary, C. Boudou, C. Ferrero, H. Elleaume, A. Bravin, F. Esteve, and D. Babot, “A Hybrid Approach for Fast Simulation of Dose Deposition in Stereotactic Synchrotron Radiotherapy,” *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 55, pp. 1008–1017, 2008.
- [24] F. Smekens, N. Freud, J. M. Letang, J. F. Adam, C. Ferrero, H. Elleaume, A. Bravin, F. Esteve, and D. Babot, “Simulation of dose deposition in stereotactic synchrotron radiation therapy : a fast approach combining Monte Carlo and deterministic algorithms,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 54, pp. 4671–4685, 2009.
- [25] C. Le Loirec, N. Freud, J. M. Letang, and B. Babot, “Investigation of a fast hybrid simulation approach for dose calculations in hadrontherapy.” Workshop on hadron beam therapy in cancer, Erice-Sicily-Italy (24th April - 1st May 2009).
- [26] B. Vanderstraeten *et al.*, “Conversion of CT numbers into tissue parameters for Monte Carlo dose calculations : a multi-centre study,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 52, pp. 539–562, 2007.
- [27] C. Le Loirec, J. C. Garcia-Hernandez, G. Bonniaud, B. Poumarede, and D. Lazaro, “Dosimetric verification of PenSSaRT, a new Monte Carlo dose calculation system based on PENELOPE and dedicated to patient-specific treatment quality control in radiotherapy.” MCTP 2012, Sevilla (15 au 18 Mai 2012).
- [28] H. H. Liu, F. Verhaegen, and L. Dong, “A method of simulating dynamic multileaf collimators using Monte Carlo techniques for intensity-modulated radiation therapy,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 46, pp. 2283–2298, 2001.

- [29] C. Le Loirec *et al.*, “PD-0569 : Incorporating dynamic motion in PENELOPE,” *Radiotherapy and Oncology*, vol. 106, p. S218, 2013.
- [30] D. Lazaro *et al.*, “Denoising techniques combined to Monte Carlo simulations for the prediction of high-resolution portal images in radiotherapy treatment verification,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 58, pp. 3433–3459, 2013.
- [31] M. Lopez-Noriega, G. Bonniaud, C. Le Loirec, D. Lazaro, F. Lavielle, E. Filippi, B. Poumarede, and J. Coulot, “Validation d’un outil de calcul de dose Monte Carlo pour la radiologie interventionnelle.” Journées Françaises de Radiologie 2013, Paris (18 au 22 Octobre 2013).
- [32] C. Le Loirec and D. Chambellan and D. Tisseur, “Image-guided treatment using an X-ray therapy unit and gold nanoparticles : test of concept,” *Radiation protection dosimetry*, vol. 169, pp. 331–335, 2016.
- [33] SFEN, “Le nucléaire accélère sa transformation numérique.” Revue Générale Nucléaire - Mai/Juin 2017 - N°3.
- [34] IAEA, “Implementing digital instrumentation and control systems in the modernization of nuclear power plants,” *IAEA Nuclear Energy Series*, vol. NP-T-1.4, 2009.
- [35] E. A. Patterson, R. J. Taylor, and M. Bankhead, “A framework for an integrated nuclear digital environment,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 87, pp. 97–103, 2016.
- [36] G. D. Gironimo *et al.*, “An interactive design approach for nuclear fusion : remote handling system for FAST divertor,” *International Journal on Interactive Design and Manufacturing*, vol. 8, pp. 55–65, 2014.
- [37] R. Y. Lu and Z. Karoutas and T. L. Sham, “CASL virtual reactor predictive simulation : grid to rod fretting wear,” *Journal of the Minerals, Metals and Materials*, vol. 63, pp. 57–62, 2011.
- [38] B. Faure *et al.*, “Neutronic calculation of an axially heterogeneous ASTRID fuel assembly with APOLLO3® : analysis of biases and foreseen improvements,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 115, pp. 88–104, 2018.
- [39] S. Langenbuch, W. Maurer, and W. Werner, “Coarse mesh flux expansion method for the analysis of space time effects in large light water reactor cores,” *Nuclear Science Engineering*, vol. 63, pp. 437–456, 1977.
- [40] R. Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovski, A. Cossic, and I. Zmijarevic, “APOLLO2 : A user oriented, portable modular code for multi-group transport assembly calculations,” *Nuclear Science Engineering*, vol. 100, pp. 352–362, 1988.
- [41] K. S. Smith, “Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 17, pp. 303–335, 1986.
- [42] K. Koebke, “On the reconstruction of local neutron flux and currents distributions from nodal schemes,” *Nuclear Science Engineering*, vol. 91, pp. 123–131, 1985.
- [43] G. Rossiter, “Development of the ENIGMA fuel performance code for whole core analysis and dry storage assessments,” *Nuclear Engineering Technology*, vol. 43, 2011.
- [44] B. Merk *et al.*, “On a roadmap for future industrial nuclear reactor core simulation in the UK to support the nuclear renaissance,” *Energies*, vol. 11, p. 3509, 2018.
- [45] H. Heidari, E. Allameh, B. de Vries, and H. Timmermans, “Smart BIM virtual prototype implementation,” *Automation Construction*, vol. 30, pp. 134–144, 2014.

- [46] I. Szoke, M. N. Louka, T. R. Bryntesen, S. T. Edvardsen, and J. Bratteli, “Comprehensive support for nuclear decommissioning based on 3D simulation and advanced user interface technologies,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 52, pp. 371–387, 2015.
- [47] K. Jeong, B. Choi, J. Moon, D. Hyun, J. Lee, I. Kim, G. Kim, and J. Seo, “The digital mock-up system to simulate and evaluate the dismantling scenarios for decommissioning of a NPP,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 69, pp. 238–245, 2014.
- [48] K. Jeong, B. Choi, J. Moon, D. Hyun, G. Kim, T. Kim, S. Jeong, and J. Lee, “Radiological assessment for decommissioning of major component in nuclear power plants,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 63, pp. 571–574, 2014.
- [49] Y. Chen, Y. Lin, R. Sheu, and S. Jiang, “Evaluation of radionuclides in concrete shielding for nuclear power plant decommissioning,” *Nuclear Technology*, vol. 168, pp. 508–512, 2009.
- [50] A. Raty and P. Kotiluoto, “FiR 1 TRIGA activity inventories for decommissioning planning,” *Nuclear Technology*, vol. 194, pp. 28–38, 2016.
- [51] S. Shin and J. Whang, “A study on source term assessment of the Kori unit-1 reactor vessel,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 41, pp. 86–89, 2004.
- [52] D. Cho, J. Cha, D. Kook, J. Lee, H. Choi, J. Choi, W. Ko, and J. Park, “Source term characterization program for the decommissioning waste from a CANDU reactor,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 55, pp. 1–11, 2012.
- [53] R. Thompson and S. McCann, “The application of simulation modelling in nuclear decommissioning.” WM2010 Conference. Phoenix, AZ.
- [54] Y. Iguchi, Y. Kanehira, M. Tachibana, and T. Johnsen, “Development of decommissioning engineering support system (DEXUS) of the Fugen nuclear power station,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 41, pp. 367–375, 2004.
- [55] J. B. Thevenon *et al.*, “NARVEOS : a virtual reality simulation environment for nuclear radiating working sites.” Int. Conf., Decommissioning challenges : an industrial reality, SFEN, 2008 Sept. 28th-Oct.2th Avignon, France.
- [56] J. B. Thevenon *et al.*, “Using simulation for intervention design in radiating environment : first evaluation of NARVEOS.” Proceedings of Global, 2009 Sept. 6th-11th Paris, France.
- [57] D. Hyun, I. Kim, J. Lee, G. H. Kim, K. S. Jeong, B. S. Choi, *et al.*, “A methodology to simulate the cutting process simulation of a nuclear dismantling simulation based on a digital manufacturing platform,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 103, pp. 369–383, 2017.
- [58] I. Szoke, M. N. Louka, T. R. Bryntesen, J. Brattli, S. T. Edvardsen, K. K. RoEitrheim, and K. Bodor, “Real time 3D radiation risk assessment supporting simulation of work in nuclear environments,” *Journal of Radiological Protection*, vol. 34, pp. 389–416, 2014.
- [59] R. Villari, P. Battistoni, S. Conroy, A. Manning, F. Moro, L. Petrizzi, S. Popovichev, D. B. Syme, and JET EFDA Contributors, “Shut-down dose rate benchmark experiment at JET to validate the three-dimensional advanced D1S method,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 87, pp. 1095–1100, 2012.
- [60] D. Valenza, H. Iida, R. Plenteda, and R. Santoro, “Proposal of shutdown dose estimation method by Monte Carlo code,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 55, pp. 411–418, 2001.
- [61] Y. Chen and U. Fisher, “Rigorous MCNP based shutdown dose rate calculations : computational scheme, verification calculations and application to ITER,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 63-64, pp. 107–114, 2002.

- [62] R. Pampin, A. Davis, R. A. Forrest, D. A. Barnett, I. Davis, and M. Z. Youssef, "Status of novel tools for estimation of activation dose," *Fusion Engineering and Design*, vol. 85, pp. 2080–2085, 2010.
- [63] J.-C. Jaboulay, E. Brun, F.-X. Hugot, T.-D. Huynh, F. Malouch, D. Mancusi, and A. Tsilani-zara, "Rigorous-two-Steps scheme of TRIPOLI-4® Monte Carlo code validation for shutdown dose rate calculation," *EPJ Web Conf.*, vol. 153, p. 02008, 2017.
- [64] Y. Wu *et al.*, "CAD-based Monte Carlo program for integrated simulation of nuclear system SuperMC," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 82, pp. 161–168, 2015.
- [65] Y. Wu *et al.*, "CAD-based interface programs for fusion neutron transport simulation," *Fusion Engineering and Design*, vol. 84, pp. 1987–1992, 2009.
- [66] T. Visonneau, L. Pangault, F. Malouch, F. Malvagi, and F. Dolci, "NARMER-1 : a photon point-kernel code with build-up factors," *EPJ Web of Conferences*, vol. 153, p. 06028, 2017.
- [67] M. Longeot *et al.*, "Panthere : simulation software for 3D dose rate calculation in complex nuclear facilities," *Progress in Nuclear Energy and Technology*, vol. 4, pp. 557–560, 2014.
- [68] K. Fix, P. Keall, K. Dawson, and J. V. Siebers, "Monte Carlo source model for photon beam radiotherapy : photon source characteristics," *Medical Physics*, vol. 31, p. 3106, 2004.
- [69] X. Ming *et al.*, "A measurement based generalized source model for Monte Carlo dose simulations of CT scans," *Physics in Medicine and Biology*, vol. 62, p. 1759, 2017.
- [70] R. Juarez *et al.*, "ITER plasma source and building modelling to produce radiation maps," *Nuclear Fusion*, vol. 58, p. 126012, 2018.
- [71] J. Sempau, A. Sanchez-Reyes, F. Salvat, H. O. ben Tahar, S. B. Jiang, and J. M. Fernandez-Varea, "Monte Carlo simulation of electron beams from an accelerator head using PENE-LOPE," *Physics in Medicine and Biology*, vol. 46, pp. 1163–1186, 2001.
- [72] K. Fix, P. Keall, and J. V. Siebers, "Photon beam subsource sensitivity to the initial electron beam parameters," *Medical Physics*, vol. 32, pp. 1164–1175, 2005.
- [73] E. Brun *et al.*, "TRIPOLI-4® CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 82, p. 151, 2015.
- [74] G. Gualdrini and P. Ferrari, "Monte Carlo variance reduction techniques : an overview with some practical examples," *Radiat. Prot. Dosimetry*, vol. 146, pp. 425–433, 2011.
- [75] A. Haghghat and J. C. Wagner, "Monte Carlo variance reduction with deterministic importance functions," *Progress in Nuclear Energy*, vol. 42, pp. 25–53, 2003.
- [76] J. F. Williamson, "Monte Carlo evaluation of kerma at a point for photon transport problems : Monte Carlo calculation of kerma at a point," *Medical Physics*, vol. 14, pp. 567–576, 1987.
- [77] C. A. Carlsson and G. A. Carlsson, "2 - Dosimetry in Diagnostic Radiology and Computerized Tomography." *The Dosimetry of Ionizing Radiation*, Academic Press, San Diego, 1990.
- [78] F. Baldacci *et al.*, "A track length estimator method for dose calculations in low-energy X-ray irradiations : implementation, properties and performance," *Zeitschrift fur Medizinische Physik*, vol. 25, pp. 36–47, 2015.
- [79] A. Mittone *et al.*, "An efficient numerical tool for dose deposition prediction applied to synchrotron medical imaging and radiation therapy," *Journal of Synchrotron Radiation*, vol. 20, pp. 785–792, 2013.
- [80] E. J. McGrath and D. C. Irving, "Techniques for Efficient Monte Carlo Simulation. Volume 3. Variance Reduction." Defense Technical Information Center, Fort Belvoir, VA, Mar. 1973.

- [81] N. Freud, J. Letang, and D. Babot, “A hybrid approach to simulate multiple photon scattering in x-ray imaging,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 227, no. 4, pp. 551 – 558, 2005.
- [82] F. Smekens *et al.*, “Split exponential track length estimator for monte-carlo simulations of small-animal radiation therapy,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 59, pp. 7703–7715, 2014.
- [83] J. E. Sweezy, “A Monte Carlo volumetric-ray-casting estimator for global fluence tallies on gpus,” *Journal of Computational Physics*, vol. 372, pp. 426 – 445, 2018.
- [84] P. Cantot, “Techniques et Technologies de modélisation et simulation.,” 2006.
- [85] Legifrance, “Arrêté du 7 février 2012 fixant les règles générales relatives aux installations nucléaires de base..” legifrance.gouv.fr, 2012.
- [86] G. K. Svensson, “Quality assurance in radiation therapy : Physics efforts,” *International Journal of Radiation Oncology Biology Physics*, vol. 10, pp. 23–29, 1984.
- [87] A. Ahnesjo and M. M. Aspradakis, “Dose calculations for external photon beams in radiotherapy,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 44, pp. R99–R155, 1999.
- [88] J. Unkelbach, M. Alber, M. Bangert, R. Bohrantz, T. C. Y. Chan, J. O. Deasy, A. Fredriksson, B. L. Gorissen, M. van Herk, W. Lei, H. Mahmoudzadeh, O. Nohadani, J. V. Siebers, M. Witte, and H. Wu, “Robust radiotherapy planning,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 63, p. 22TR02, 2018.
- [89] X. G. Xu, “Computational Phantoms for Organ Dose Calculations in Radiation Protection and Imaging,” in *The Phantom of Medical and Health Physics*, 2013.
- [90] W. Snyder, M. Ford, G. Warner, and J. H. Fisher, “Estimates for absorbed fractions for monoenergetic photon sources uniformly distributed in various organs of a heterogeneous phantom,” *Journal of Nuclear Medicine*, vol. 47, 1969.
- [91] X. G. Xu, T. C. Chao, and A. Bozkurt, “VIP-man : an image-based whole-body adult male model,” *Health Physics*, vol. 78, p. 476, 2000.
- [92] A. Vazquez *et al.*, “Development of posture-specific computational phantoms using motion capture technology and application to radiation dose-reconstruction for the 1999 Tokai-Mura nuclear criticality accident,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 59, p. 5277, 2014.
- [93] M. Constantin, J. Perl, T. LoSasso, A. S. and D. Whittum, A. Narula, M. Svatos, and P. J. Keall, “Modeling the TrueBeam linac using a CAD to Geant4 geometry implementation : Dose and IAEA-compliant phase space calculations,” *Medical Physics*, vol. 38, p. 4018, 2011.
- [94] H. Tsige-Tamirat *et al.*, “Use of McCad for the conversion of ITER CAD data to MCNP geometry,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 83, pp. 1771–1773, 2008.
- [95] C. Le Loirec, Y. Penelieu, C. Lacroix, M. Soldaini, D. van Houtte, and J. P. Friconneau, “ITER transfer cask : Preliminary assessment of dose rate due to dust remained in the cask,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 132, pp. 90–98, 2018.
- [96] A. Davis, J. Barzilla, A. Ferrari, K. T. Lee, V. Vlachoudis, and P. P. H. Wilson, “FluDAG : A CAD based tool for high energy physics,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 915, pp. 65–74, 2019.
- [97] D. Grosse *et al.*, “Status of the McCad geometry conversion tool and related visualization capabilities for 3D fusion neutronics calculations,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 88, pp. 2210–2214, 2013.

- [98] Y. Qiu, L. Lu, and U. Fisher, “Integrated approach for fusion multi-physics coupled analyses based on hybrid CAD and mesh geometries,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 96-97, pp. 159–164, 2015.
- [99] P. P. H. Wilson *et al.*, “Acceleration techniques for the direct use of CAD-based geometry in fusion neutronics analysis,” *Fusion Engineering and Design*, vol. 85, pp. 1759–1765, 2010.
- [100] A. C. Turner *et al.*, “A method to generate equivalent energy spectra and filtration models based on measurements for multidetector CT Monte Carlo dosimetry simulations,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 36, pp. 2154–2164, 2009.
- [101] C. Adrien, *Développement d’un outil d’optimisation de la dose aux organes en fonction de la qualité image pour l’imagerie scanographique*. PhD thesis, Ecole Doctorale Modélisation et Instrumentation en Physique, Energie, Géosciences et Environnement (Orsay, Essonne), 2015.
- [102] C. Adrien, C. Le Loirec, S. Dreuil, and J.-M. Bordy, “A new Monte Carlo tool for organ dose estimation in computed tomography,” *Radioprotection*, vol. 55, pp. 123–124, 2020.
- [103] W. Schneider *et al.*, “Correlation between CT numbers and tissue parameters needed for Monte Carlo simulations of clinical dose distributions,” *Physics in Medicine and Biology*, vol. 45, p. 459, 2000.
- [104] A. Serikov, U. Fisher, D. Anthoine, L. Bertalot, M. De Bock, R. O’Connor, R. Juarez, and V. Krasilnikov, “Cad-based shielding analysis for iter port diagnostics,” *EPJ Web of Conferences*, vol. 153, p. 03010, 2017.
- [105] S. E. Derenzo, “Precision measurement of annihilation point spread distributions for medically important positron emitters. Positron Annihilation - ed. R R Hasiguti and K Fuliwara (Sendai, Japan : The Japan Institute of Metals),” 1979.
- [106] L. Jodal, C. Le Loirec, and C. Champion, “Positron range in PET imaging : an alternative approach for assessing and correcting the blurring,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 57, pp. 3931–3943, 2012.
- [107] H. Alva-Sanchez, C. Quintana-Bautista, A. Martinez-Davalos, M. A. Avila-Rodriguez, and M. Rodriguez-Villafuerte, “Positron range in tissue-equivalent materials : experimental microPET studies,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 61, pp. 6304–6321, 2016.
- [108] A. Rahmin, J. Qi, and V. Sossi, “Resolution modeling in PET imaging : theory, practice, benefits and pitfalls,” *Med. Phys.*, vol. 40, p. 064301, 2013.
- [109] S. F. Haber, S. E. Derenzo, and D. Uber, “Application of mathematical removal of positron range blurring in positron emission tomography,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 37, pp. 1293–1299, 1990.
- [110] B. Bing, A. Ruangma, R. Laforest, Y. C. Tai, and R. M. Leahy, “Positron range modeling for statistical PET image reconstruction,” *IEEE NSS Conf Rec*, vol. 4, pp. 2501–2505, 2003.
- [111] V. Y. Panin, F. Kehren, C. Michel, and M. Casey, “Fully 3D PET reconstruction with system matrix derived from point source measurements,” *IEEE Trans. Med. Imaging*, vol. 25, pp. 907–921, 2006.
- [112] A. Perkins, M. Narayanan, B. Zhang, J. Scheuermann, J. Karp, and L. Shao, “Influence of a post-reconstruction resolution recovery algorithm on quantitation,” *J. Nucl. Med.*, vol. 54, p. 2128, 2013.
- [113] Y. S. Lee, J. S. Kim, K. M. Kim, J. H. Kang, S. M. Lim, and H. J. Kim, “Performance measurement of PSF modeling reconstruction (true X) on Siemens Biograph TruePoint TrueV PET/CT,” *Ann. Nucl. Med.*, vol. 28, pp. 340–348, 2014.

- [114] A. Alessio and L. MacDonald, "Spatially variant positron range modeling from CT for PET image reconstruction," *IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.*, vol. 1997, pp. 3637–3640, 2008.
- [115] J. Cal-Gonzalez, M. Perez-Liva, J. Lopez-Herraiz, J. J. Vaquero, M. Desco, and J. Udias, "Tissue-dependent and spatially-variant positron range correction in 3D PET," *IEEE Tans. Med. Imaging*, vol. 34, pp. 2394–2403, 2015.
- [116] R. Kraus, G. Delso, and S. I. Ziegler, "Simulation study of tissue-specific positron range correction for the new biograph mMR whole-body PET/MR system," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 59, pp. 1900–1909, 2012.
- [117] O. Bertolli, A. Eleftheriou, M. Cecchetti, N. Camarlinghi, N. Belcari, and C. Tsoumpas, "PET iterative reconstruction incorporating an efficient positron range correction method," *Physica Medica*, vol. 32, pp. 323–330, 2016.
- [118] J. C. Cheng, R. Boellard, and R. Laforest, "Evaluation of the effect of magnetic field on PET spatial resolution and contrast recovery using clinical PET scanners and EGSnrc simulations," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 62, pp. 101–110, 2015.
- [119] A. Sanchez-Crespo, P. Andreo, and S. A. Larsson, "Positron flight in human tissues and its influence on PET image spatial resolution," *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging*, vol. 31, pp. 44–51, 2004.
- [120] J. Cal-Gonzalez, J. L. Herraiz, S. Espana, M. Desco, J. J. Vaquero, and J. M. Udias, "Validation of penelope positron range estimations," in *IEEE Nuclear Science Symposium Medical Imaging Conference*, pp. 2396–2399, 2010.
- [121] J. Cal-Gonzalez, J. L. Herraiz, S. Espana, P. M. G. Corzo, and J. M. Udias, "A general framework to study positron range distributions," in *2011 IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*, pp. 2733–2737, 2011.
- [122] E. Vano, "Why is radiological protection different in medicine?," *Journal of Radiological Protection*, vol. in press, 2021.
- [123] S. A. Graves and R. F. Hobbs, "Dosimetry for optimized, personalized radiopharmaceutical therapy," *Seminars in Radiation Oncology*, vol. 31, pp. 37–44, 2021.
- [124] J. D. Evans, D. G. Politte, B. R. Whiting, *et al.*, "Noise-resolution tradeoffs in x-ray CT imaging : a comparison of penalized alternating minimization and filtered backprojection algorithms," *Med. Phys.*, vol. 38, pp. 1444–58, 2011.
- [125] C. C. Brunner, S. F. Abboud, C. Hoeschen, *et al.*, "Signal detection and location-dependent noise in cone-beam computed tomography using the spatial definition of the hotelling SNR," *Med. Phys.*, vol. 39, pp. 3214–28, 2012.
- [126] Y. Zhang, S. Leng and L. Yu, *et al.*, "Correlation between human and model observer performance for discrimination task in CT," *Phys. Med. Biol.*, vol. 59, pp. 3389–3404, 2014.
- [127] C. H. McCollough, G. H. Chen, W. Kalender, *et al.*, "Achieving routine Submillisievert CT scanning : report from the summit of radiation dose in CT," *Radiology*, vol. 264, pp. 567–580, 2012.
- [128] J. D. Brenner, "Is it time to retire the CTDI for CT quality assurance and dose optimization?," *Med. Phys.*, vol. 32, pp. 3225–6, 2005.
- [129] S. Mori, K. Nishizawa, M. Ohno, *et al.*, "Conversion factor for CT dosimetry to assess patient dose using a 256-slice CT scanner," *Br. J. Radiol.*, vol. 79, pp. 888–92, 2006.

- [130] I. H. Chou and C. F. Fan, “Developing integrated decommissioning information management system (IDIMS) of nuclear facilities,” *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 43, pp. 596–604, 2006.
- [131] M. Bangert *et al.*, “Analytical probabilistic modeling for radiation therapy treatment planning,” *Phys. Med. Biol.*, vol. 58, pp. 5401–5419, 2013.
- [132] J. C. Wagner and A. Haghghat, “Automated variance reduction of monte carlo shielding calculations using the discrete ordinates adjoint function,” *Nuclear Science Engineering*, vol. 128, pp. 186–208, 1998.
- [133] J. C. Wagner, D. E. Peplow, and S. W. Mosher, “Fw-cadis method for global and regional variance reduction of monte carlo radiation transport calculations,” *Nuclear Science Engineering*, vol. 176, pp. 37–57, 2014.
- [134] J. Sweezy, F. Brown, T. Booth, J. Chiaramonte, and B. Preeg, “Automated variance reduction for MCNP using deterministic methods,” *Radiat Prot Dosimetry*, vol. 116, pp. 508–512, 2005.
- [135] M. Matijevic, D. Pevec, and K. Trontl, “Boration modeling of the pwr biological shield using SCALE6.1 hybrid shielding methodology,” *Annals of Nuclear Energy*, vol. 85, pp. 979 – 994, 2015.
- [136] M. Matijevic, D. Pevec, and K. Trontl, “Pwr containment shielding calculations with SCALE6.1 using hybrid deterministic-stochastic methodology,” *Science and Technology of Nuclear Installations*, vol. 2016, p. 7328131, 2005.

CV

Cindy LE LOIREC

Ingénieur de recherche

Née le 27 Avril 1979 à Mont-Saint-Martin(54)

Nationalité Française

Mariée, deux enfants

Coordonnées professionnelles

CEA DES/IRENE/DER/SPRC
Laboratoire de Projets Nucléaires
CEA Cadarache - Bâtiment 1222
F-13108 Saint-Paul-lez-Durance Cedex
Tel : +33 (0)4 42 25 40 62
E-mail : Cindy.LELOIREC@cea.fr

Coordonnées personnelles

105F Quartier derrière les Aires
Lotissement Adam
83560 Ginasservis
Tel : 06 26 36 63 75
E-mail : leloirec@hotmail.com

EXPÉRIENCES PROFESSIONNELLES

2016-....

Ingénieur d'études CEA DES/IRENE/DER/SPRC, Cadarache

Radioprotection : Contrats SSA-57 et SSA-62 en soutien à ITER

Activation : Calculs d'activation dans le cadre de démantèlements d'installations du centre de Cadarache
Suivi technique de la prestation associée à l'étude

Projet : Montage de projets internes CEA

Encadrement : Stage par alternance de Nathan HERNANDEZ " Développement d'un modèle de source Monte Carlo pour l'estimation de la dose dans les activités de démantèlement", Septembre 2017 - Septembre 2018
Stage par alternance de Gaël LEMANIRY " Développement d'un modèle de source virtuelle basée sur les points de collision pour l'estimation de la dose dans les activités de démantèlement", Septembre 2019 - Septembre 2020

Stage double diplôme M2 et fin d'études d'école d'ingénieur de Nicolas GUILLEVIC " Combinaison de méthodes de réduction de variance pour optimiser l'estimation des débits de dose dans les opérations de démantèlement", Mars 2021 - Septembre 2021

Thèse d'Ettore GUADAGNI "Développement d'une approche de simulation hybride pour les calculs de dose dans les activités de démantèlement", Janvier 2019 - ...

- 2015-2016 **Physicien médical en imagerie, Mise à disposition au GHU Henri Mondor, Créteil**
- Activités cliniques : Contrôle qualité en imagerie
Estimation et optimisation de la dose délivrée aux patients
- 2012-2016 **Ingénieur de recherche CEA LIST/DM2I, Saclay**
- R & D : Ingénieur en recherche et développement dans le domaine de la dosimétrie et de l'imagerie médicale
Responsable CAMARI de l'accélérateur Versa HD (ELEKTA) de la plateforme DOSEO
Responsable du scanner General Electric de la plateforme DOSEO
- Projet : Montage de projets nationaux (Appels à projet de type ANR, ANSM,...) et européen (type EURADOS-EURAMET)
- Encadrement : Thèse de Camille ADRIEN "Développement d'un module de planification en imagerie radiologique pour optimiser la qualité image et la dose délivrée au patient", Octobre 2012 - Octobre 2015
- 2010-2012 **Ingénieur de recherche CEA LIST/DCSI, Saclay**
- Projet INSPIRA (Informatics for the Safety of Processes and Installations in Radiotherapy)
"Développement d'un outil de contrôle des TPS par simulation Monte Carlo"
- 2008-2009 **Emploi de chercheur Post-Doctorant, INSA Lyon, laboratoire CN-DRI**
- Projet ANR SIMCA2 (Simulation d'une Irradiation par Ions Carbone pour le Traitement du Cancer)
"Approches de simulation rapides pour le calcul de dose en hadronthérapie"

CURSUS UNIVERSITAIRE

- 2010 **Diplôme de Qualification en Physique Radiologique et Médicale**
INSTN - CEA Saclay et CGFL Dijon
- 2007 **Doctorat en Physique - Université Paul Verlaine - Metz**
"Simulation Monte Carlo de suivi de positrons dans la matière biologique :
Applications en imagerie médicale"
Directeur de thèse : Professeur Jocelyn Hanssen
Co-directeur : Professeur Christophe Champion
- 2004 **Diplôme d'Études Approfondies (DEA) Rayonnement et Imagerie
en Médecine - Université Paul Sabatier - Toulouse III**
Spécialité Physique Radiologique et Médicale
Mention A. Bien
"Reconstruction des volumes réels déterminés en imagerie par émission de
positrons"
Encadrant de stage : Professeur Christophe Champion
- 2002-2003 **Ecole Nationale Scientifique de Physique de Strasbourg**
2^{me} année
- 2002 **Maîtrise de Physique - Université Paul Verlaine - Metz**
Mention Bien
- 2001 **Licence de Physique - Université Paul Verlaine - Metz**
Mention A. Bien
- 1997-2000 **Classe Préparatoire aux Grandes Ecoles - Lycée Fabert - Metz**
Mathématiques - Physique

FORMATIONS COMPLÉMENTAIRES

2021	Neutronique des réacteurs nucléaires : phénoménologie INSTN - CEA Saclay - Distanciel
2018	Etat des lieux et inventaire radiologique en vue du démantèlement d'une installation INSTN - CEA Marcoule
2013-2014	Encadrer et Valoriser la thèse INSTN - CEA Saclay
2014	Propriété Intellectuelle CEA Saclay
2014	Conduite de Projet CEA DRT LIST
2012-2014	CAMARI - Option accélérateur de particules Formation initiale à l'INSTN de Cherbourg en 2012 Certificat obtenu le 13 Novembre 2014

LANGUES - INFORMATIQUE - PHYSIQUE MÉDICALE

Langues :	Français : langue maternelle	
	Anglais : auteur de publications, activités de recherche dans un contexte international, participation à des conférences anglophones	
	Allemand : notions scolaires	
Informatique :	Systèmes d'exploitation :	Windows, Unix/Linux
	Logiciels de bureautique :	Ms Office Pro, OpenOffice, L ^A T _E X
	Langages de programmation :	C, C++, FORTRAN 90
	Notions de parallélisme avec MPI	
	Codes de simulation Monte Carlo :	GEANT4, PENELOPE, TRIPOLI-4®, MCNP
	Codes de neutronique :	notions en APOLLO2 et CRONOS2
	Code d'activation :	DARWIN
Physique Médicale :	Etude dosimétrique de plans de traitement Contrôle de qualité des installations de radiothérapie, radiodiagnostic et médecine nucléaire	

ENSEIGNEMENT ET FORMATION

- 2012-2013 **Master Physique - Parcours Physique Médicale, Université Rennes 1**
"Applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" (6 h)
- 2014-2015 **Master Physique - Parcours Physique Médicale, Université Rennes 1**
"Applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" (6 h)
- TP - Formation CAMARI, INSTN Saclay - DOSEO**
"Option accélérateur de particules" (2 sessions de 3 h)
- Module optionnel DQPRM, INSTN Saclay - DOSEO**
"Calcul de dose en radiothérapie" (12 h)
- Module optionnel DQPRM, INSTN Saclay - DOSEO**
"Calcul de dose en imagerie" (9 h)
- 2018-2019 **Master Physique - Parcours Physique Médicale, Université Rennes 1**
- 2019-2020 "Applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" (6 h)
- BTS Contrôle des rayonnements ionisants et application des techniques de protection (CRIATP)**
"Radioactivité" (30 h)
- 2020-2021 **Master Physique - Parcours Physique Médicale, Université Rennes 1**
"Applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" (6 h)
- BTS Contrôle des rayonnements ionisants et application des techniques de protection (CRIATP)**
"Radioactivité" (45 h)
- 2021-2022 **Master Physique - Parcours Physique Médicale, Université Rennes 1**
"Applications Monte Carlo pour la radiothérapie et la radiologie" (7 h)
- Licence Professionnelle Contrôle des rayonnements ionisants et application des techniques de protection (CRIATP)**
"Radioactivité" (42 h)

- 2012-2015 **Encadrement de Camille ADRIEN en doctorat**
"Développement d'un module de planification de l'examen en imagerie radiologique pour une optimisation de la qualité image en fonction de la dose délivrée"
Directeur de thèse : Jean-Marc BORDY (CEA-LIST, LNHB)
- 2019-.... **Encadrement d'Ettore Guadagni en doctorat**
"Développement d'une approche de simulation hybride pour les calculs de dose dans les activités de démantèlement"
Directeur de thèse : Cheikh DIOP (CEA-DES, SERMA)

TRAVAUX D'EXPERTISE

"Referee" de journaux internationaux :

Physica Medica, Medical and Biological Engineering and Computing, Journal of Cancer Research and Therapeutic Oncology, International Journal of Nanomedicine, The European Physical Journal Plus, Frontiers In Physics

Participation au groupe de travail IMAD (Instrumentation et Mesure pour l'Assainissement Démentèlement)

Membre du comité scientifique de la conférence ANIMMA 2021

Communications

PUBLICATIONS

- "Positron follow-up in liquid water : I. A new Monte Carlo track structure code"
C. Champion and **C. Le Loirec**
[Phys. Med. Biol. 51, 1707-1723 \(2006\)](#)
- "Positron follow-up in liquid water : II. Spatial and energetic study for the most important radioisotopes used in PET"
C. Champion and **C. Le Loirec**
[Phys. Med. Biol. 52, 6605-6625 \(2007\)](#)
- "Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part I : The case of the allowed decay isotopes"
C. Le Loirec and C. Champion
[Nucl. Instrum. Meth. A. 582, 644-653 \(2007\)](#)
- "Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part II : The case of the radio-metals"
C. Le Loirec and C. Champion
[Nucl. Instrum. Meth. A. 582, 654-664 \(2007\)](#)
- "Track structure simulation for positron emitters of medical interest. Part III : The case of the non-standard isotopes"
C. Le Loirec and C. Champion
[Nucl. Instrum. Meth. A. 582, 665-672 \(2007\)](#)
- "EPOTRAN : a full-differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid and gaseous water"
C. Champion, **C. Le Loirec** and B. Stosic
[International Journal of Radiation Biology 88, 54-61 \(2012\)](#)
- "Positron range in PET imaging : an alternative approach for assessing and correcting the blurring"
L. Jodal, **C. Le Loirec** and C. Champion
[Phys. Med. Biol. 57, 3931-3943 \(2012\)](#)
- " Denoising techniques combined to Monte Carlo simulations for the prediction of high-resolution portal images in radiotherapy treatment verification"
D. Lazaro, E. Barat, **C. Le Loirec**, T. Dautremer, T. Montagu, L. Guerin and A. Battalla
[Phys. Med. Biol. 58, 3433-3459 \(2013\)](#)
- " Comparison of Geant4-DNA simulation of S-values with other Monte Carlo codes"
T. Andre, F. Morini, M. Karamitros, R. Delorme, **C. Le Loirec**, L. Campos, C. Champion, J.-E. Groetz, M. Fromm, M.C. Bordage, P. Barberet, M. Bernal, Z. Francis, V. Ivanchenko, B. Mascialino, C. Zacharatou, M. Bardies, S. Incerti
[Nucl. Instrum. Meth. B. 319, 87-94 \(2014\)](#)

- "Positron range in PET imaging : non-conventional isotopes"
L. Jodal, **C. Le Loirec** and C. Champion
[Phys. Med. Biol. 59, 7419-7434 \(2014\)](#)
- "Image-guided treatment using an X-ray therapy unit and gold nanoparticles : test of concept"
C. Le Loirec, D. Chambellan and D. Tisseur
[Radiation Protection Dosimetry 169, 331-335 \(2016\)](#)
- "Positron backscattering from solid targets : modeling of scattering processes via various approaches"
B. Kribaa, Z. Rouabah, **C. Le Loirec**, C. Champion and N. Bouarissa
[Micron 87, 46-50 \(2016\)](#)
- "ITER transfer cask : Preliminary assessment of dose rate due to dust remained in the cask"
C. Le Loirec, Y. Penelieu, C. Lacroix, M. Soldaini, D. van Houtte, J.P. Friconneau
[Fusion Engineering and Design 132, 90-98 \(2018\)](#)
- "Dependability assessment of ITER cask and plug remote handling system during nuclear maintenance operations"
D. van Houtte, D. Elbeze, J. P. Friconneau, C. Lacroix, **C. Le Loirec**, M. Soldaini
[Fusion Engineering and Design 136, 1342-1347 \(2018\)](#)
- "Parameters influencing the activation of dismantling nuclear facility structures"
C. Le Loirec, C. Riffard, F. Barran, V. Bellanger, Y. Penelieu, M. Villard, X. Berson, F. Jeury, R. Eschbach
[Annals of Nuclear Energy 134, 158-169 \(2019\)](#)
- "Benchmark of DEMAIN, a new calculation package for decommissioning purposes"
C. Le Loirec, M. Soualrd, G. Ritter, Y. Penelieu
[Progress in Nuclear Energy 118, 103076 \(2020\)](#)
- "A new Monte Carlo tool for organ dose estimation in computed tomography"
C. Adrien, **C. Le Loirec**, S. Dreuil, J-M Bordy
[Radioprotection, 55, 123-134 \(2020\)](#)
- "Comparison of variance reduction techniques for gamma dose rate determination"
E. Guadagni, **C. Le Loirec**, D. Mancusi
[Eur. Phys. J. Plus 136, 232 \(2021\)](#)
- "Experimental validation of DEMAIN for predicting induced radioactivity in research testing reactor civil engineering"
G. Ritter, F. Merniz, V. Brun-Magaud, G. Martin, **C. Le Loirec**, M. Ledieu, C. Motuelle, A. Aguiar-Martins, A. Aupy
[Annals of Nuclear Energy 108569 \(2021\)](#)

- "Development of a generalized source model for flux estimation in nuclear reactors"
C. Le Loirec, N. Hernandez
soumission : [Annals of Nuclear Energy](#)
- "A new hybrid next-event estimator for photon-based Monte Carlo dose rate calculations"
E. Guadagni, C. Le Loirec, Y. Penelieu, J. M. Letang, D. Mancusi, C. Diop
soumission : [Eur. Phy. J. Plus](#)

COMMUNICATIONS ORALES

- "Monte Carlo simulation of ^{18}F disintegration in biological matter. Application to tumour volume reconstruction in PET"
C. Le Loirec and C. Champion
[Deuxième Journées des Boursiers de formation recherche, Science Festival 2005, Luxembourg \(Octobre 2005\)](#)
- "Simulation Monte Carlo d'une désintégration de ^{18}F dans la matière biologique : Application à la Tomographie par Emission de Positrons"
C. Le Loirec and C. Champion
[Enseignement Post-Universitaire : Aspects Pratiques de la méthode Monte Carlo : applications à la radiothérapie et à la médecine nucléaire, Toulouse \(Avril 2006\)](#)
- "Suivi de positrons et de photons dans la matière biologique : Application à la tomographie par émission de positrons"
C. Le Loirec et C. Champion
[13ème Journées d'Etudes de la Chimie sous Rayonnement, Le Croisic \(28 Mai-1er Juin 2006\)](#)
- "Suivi de positrons et de photons dans l'eau : Application à la Tomographie par Emission de Positrons"
C. Champion and C. Le Loirec
[4ème colloque de la division Physique Atomique, Moléculaire et Optique de la Société Française de Physique, Dijon \(Juillet 2006\)](#)
- "Positron and photon following up in the biological matter : Application to Positron Emission Tomography"
C. Le Loirec and C. Champion
[Workshop In Vivo Imaging, Liege \(Juillet 2006\)](#)
- "La Tomographie par Emission de Positrons (TEP) : modélisation par simulation Monte Carlo"
C. Le Loirec and C. Champion
[1er Congrès International Radiations Medicales : Recherche et Applications, Marrakech \(Maroc\) \(Avril 2007\)](#)

- "EPOTRAN : a full differential Monte Carlo code for electron and positron transport in liquid water" C. Champion and **C. Le Loirec**
[1er Congrès International Radiations Médicales : Recherche et Applications, Marrakech \(Maroc\)\(Avril 2007\)](#)
- "Dosimetric verification of PenSSaRT, a new Monte Carlo dose calculation system based on PENELOPE and dedicated to patient-specific treatment quality control in radiotherapy"
C. Le Loirec, J. C. Garcia-Hernandez, G. Bonniaud, B. Poumarede and D. Lazaro
[MCTP 2012, Sevilla \(15 au 18 Mai 2012\)](#)
- "Prediction of high-resolution portal images for treatment verification in radiotherapy by coupling Monte Carlo simulations to non parametric Bayesian denoising"
D. Lazaro-Ponthus, E. Barat, **C. Le Loirec**, T. Dautremer, T. Montagu, D. Patin, L. Guerin and A. Batalla
[MCTP 2012, Sevilla \(15 au 18 Mai 2012\)](#)
- "Monte Carlo PenRadio system for dose calculation in medical imaging"
C. Adrien, M. Lopez-Noriega, G. Bonniaud, J.M. Bordy, **C. Le Loirec** and B. Poumarede
[International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 \(SNA + MC 2013\), La Cité des Sciences et de l'Industrie, Paris, France \(27 au 31 Octobre 2013\)](#)
DOI : <http://dx.doi.org/10.1051/snmc/201401601>
- "Validation d'un outil de calcul de dose Monte Carlo pour la radiologie interventionnelle"
M. Lopez-Noriega, G. Bonniaud, **C. Le Loirec**, D. Lazaro, F. Lavielle, E. Filippi, B. Poumarede, J. Coulot
[Journées Françaises de Radiologie 2013, Paris \(18 au 22 Octobre 2013\)](#)
- "DOSEO : Développement d'un outil pour l'optimisation de la dose délivrée en imagerie radiologique"
C. Adrien, M. Lopez Noriega, G. Bonniaud, S. Dreuil, J.M. Bordy, **C. Le Loirec**, B. Poumarede
[Les techniques de mesure en radioprotection et les défis rencontrés dans les milieux industriel et médical, SFRP, Paris \(19 et 20 Novembre 2013\)](#)
- "Prédiction d'images EPID haute resolution pour la dosimétrie in vivo"
D. Patin, E. Barat, T. Dautremer, T. Montagu, **C. Le Loirec**, L. Guerin, A. Batalla, et D. Lazaro
[Codes de calcul en radioprotection, radiophysique et dosimétrie, SFRP, Paris \(25 et 16 Mars 2014\)](#)
- "Développement d'un logiciel Monte Carlo pour le calcul de dose en imagerie scanographique"
C. Adrien, A. Croc, J. Garcia-Hernandez, S. Dreuil, J. Plagnard, B. Poumarede, **C. Le Loirec**, J. M. Bordy
[53èmes journées scientifiques de la SFPM, Deauville \(4 au 6 Juin 2014\)](#)

- "Monte Carlo software for dose calculation in CT examinations"
[C. Adrien](#), A. Croc, J. Garcia-Hernandez, S. Dreuil, J. Plagnard, B. Poumarede, **C. Le Loirec**, J. M. Bordy
[Joint Conference of the SSRMP, DGMP, OGMP, Zurich \(9 Septembre 2014\)](#)
- "Organ dose estimation and quality image assessment in computed tomography"
[C. Adrien](#), **C. Le Loirec**, J. C. Garcia-Hernandez, S. Dreuil, D. Grevent, L. Berteloot, B. Habib-Geryes and J. M. Bordy
[Optimisation in X-ray and Molecular Imaging 2015 \(OXMI2015\), 28-30th May 2015 in Gothenburg, Sweden](#)
- "Organ dose estimation in computed tomography based on Monte Carlo simulation"
[C. Adrien](#), **C. Le Loirec**, J. C. Garcia-Hernandez, S. Dreuil and J. M. Bordy
[World congress on medical physics and biomedical engineering \(IUPESMWC 2015\), 7-12th June 2015 in Toronto, Canada](#)
- "Vers une optimisation des pratiques en scanner"
[C. Adrien](#), **C. Le Loirec**, J. C. Garcia-Hernandez, J. Plagnard, S. Dreuil, B. Habib-Geryes, D. Grevent, L. Berteloot, F. Raimondi, J. M. Bordy
[Journées Françaises de Radiologie 2015, Paris \(15 au 19 Octobre 2015\)](#)
- "Dose rate estimation inside and close to the ITER transfer cask"
C. Le Loirec, Y. Penelieu, C. Lacroix, M. Soldaini, D. van Houtte and J. P. Friconneau
[XII ITER Neutronics Meeting, Cadarache \(October, 11th, 2017\)](#)
- "Benchmark study of TRIPOLI-4® for decommissioning purposes"
C. Le Loirec, M. Soulard, G. Ritter, Y. Penelieu
[DEM 2018 - Dismantling Challenges : Industrial Reality, Prospects and Feedback Experience \(France, Avignon, 2018 October, 22d-24th\)](#)
- "Source term computation for reactor dismantling operations : Application to CEA PHEBUS facility"
[M. Soulard](#), G. Ritter, **C. Le Loirec** R. Eschbach, O. Sérot
[DEM 2018 - Dismantling Challenges : Industrial Reality, Prospects and Feedback Experience \(France, Avignon, 2018 October, 22d-24th\)](#)
- "Split-exponential track length estimator for Monte Carlo simulations in reactor dismantling operations"
[E. Guadagni](#), Y. Pénéliu, J. M. Létang, F.-X. Hugot, C. Diop, **C. Le Loirec**
[DEM 2021 - International Conference on Decommissioning Challenges : Industrial Reality, Lessons learned and Prospects \(France, Avignon, 2021 September, 13th-15th\)](#)

POSTERS

- "Monte Carlo simulation of ^{18}F disintegration in biological matter : Application to tumour volume reconstruction in PET"
C. Le Loirec and C. Champion
[IMVIE 2 symposium : imaging for medical and life sciences, Illkirch-Strasbourg \(Mars 2005\)](#)
- "Positron and photon following up in the biological matter : Application to Positron Emission Tomography"
C. Le Loirec and C. Champion
[Workshop in Vivo Imaging, Liege \(Juillet 2006\)](#)
- "Monte Carlo simulation in nuclear medicine"
C. Le Loirec and C. Champion
[1er Congrès International Radiations Médicales : Recherche et Applications \(Avril 2007\)](#)
- "Investigation of a fast hybrid simulation approach for dose calculations in hadrontherapy"
C. Le Loirec, N. Freud, J. M. Letang and B. Babot
[Workshop on hadron beam therapy in cancer, Erice-Sicily-Italy \(24th April - 1st May 2009\)](#)
- "Incorporating dynamic motion in PENELOPE"
C. Le Loirec, B. Poumarede, E. Barat, T. Dautremer, T. Montagu, L. GuÃ©rin, A. Batalla and D. Lazaro
[2nd ESTRO Forum 2013, 19th April - 23th April 2013, Geneva, Switzerland](#)
[Radiotherapy and Oncology 106 : S218](#)
- "PenSSaRT, a new Monte Carlo system for quality control in radiotherapy"
C. Le Loirec, J. C. Garcia-Hernandez, G. Bonniaud, L. Guerin, A. Batalla, B. Poumarede and D. Lazaro
[International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 \(SNA + MC 2013\), La Cité des Sciences et de l'Industrie, Paris, France \(27 au 31 Octobre 2013\)](#)
[DOI : <http://dx.doi.org/10.1051/snmc/201405306>](#)
- "Monte Carlo PENRADIO system for dose calculation in medical imaging"
C. Adrien, M. Lopez-Noriega, G. Bonniaud, J.M. Bordy, C. Le Loirec and B. Poumarede
[2013 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference \(IEEE NSS/MIC 2013; Seoul, Korea; 27 Oct - 2 Nov 2013\)](#)
[DOI : \[10.1109/NSSMIC.2013.6829369\]\(http://dx.doi.org/10.1109/NSSMIC.2013.6829369\)](#)
- "Positron range in PET imaging : including the non-standard isotopes"
L. Jodal, C. Le Loirec and C. Champion
[2013 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference \(IEEE NSS/MIC 2013; Seoul, Korea; 27 Oct - 2 Nov 2013\)](#)
- "PenSSART, un nouveau système Monte Carlo pour le contrôle de qualité en radiothé-

rapie"

C. Le Loirec, D. Lazaro, L. Guerin, A. Batalla, G. Bonniaud, B. Poumarede
[Codes de calcul en radioprotection, radiophysique et dosimétrie, SFRP, Paris \(25 et 16 Mars 2014\)](#)

- "High resolution portal image prediction for radiotherapy treatment verification and in vivo dosimetry"
[D. Patin](#), E. Barat, T. Dautremer, T. Montagu, **C. Le Loirec**, L. Guerin, A. Batalla and D. Lazaro
[ESTRO 33, Vienne, Autriche \(4 - 8 Avril 2014\)](#)
[Radiotherapy and Oncology 111 : S162](#)
- "Development and validation of an interactive dose calculation platform in interventional radiology"
[D. Patin](#), J. Garcia-Hernandez, M. Agelou, **C. Le Loirec**, B. Poumarede, C. van Ngoc Ty, J. Coulot, G. Bonniaud, F. Lavielle, B. Bodin and D. Lazaro
[53èmes journées scientifiques de la SFPM, Deauville \(4 au 6 Juin 2014\)](#)
[Physica Medica 30 : e129](#)
[DOI :10.1016/j.ejmp.2014.10.028](#)
- "Monte Carlo software for dose calculation in CT examinations"
C. Adrien, A. Croc, J-C Garcia Hernandez, S. Dreuil, J. Plagnard, B. Poumarede, **C. Le Loirec** and J-M Bordy
[MELODI Workshop \(Barcelone, Espagne ; 7 Oct - 9 Oct. 2014\)](#)
- " Image guided radiotherapy with heavy elements : proofs of concept"
C. Le Loirec, D. Chambellan and D. Tisseur
[Optimisation in X-ray and Molecular Imaging 2015 \(OXMI2015\), 28-30th May 2015 in Gothenburg, Sweden](#)
- " Dose and image quality estimation in computed tomography"
[C. Adrien](#), **C. Le Loirec**, J-C Garcia Hernandez, J. Plagnard, S. Dreuil, B. Habib-Geryes, D. Grevent, L. Berteloot, F. Raimondi and J-M Bordy
[54èmes journées scientifiques de la SFPM, Lille \(10 au 12 Juin 2015\)](#)
[Physica Medica 31 : e47](#)
[DOI :10.1016/j.ejmp.2015.10.066](#)
- "Dependability assessment of ITER cask and plug remote handling system during nuclear maintenance operations"
[D. van Houtte](#), D. Elbèze, J. P. Friconneau, C. Lacroix, J. Le Gouill, **C. Le Loirec**, M. Soldaini
[13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology \(ISFNT\), Kyoto \(25-29 September 2017\)](#)
- "Explorating risk analysis of ITER Cask and Plug Remote Handling System"
[D. van Houtte](#), A. Claisse, D. Elbèze, J. P. Friconneau, C. Lacroix, **C. Le Loirec**, M. Soldaini
[30th edition of the Symposium on Fusion Technology \(SOFT 2018\), Giardini Naxos](#)

(Messina), Sicily, Italy (16-21 September 2018)

- "A hybrid deterministic-stochastic method for the calculation of dose rate in reactors dismantling operations"
E. Guadagni, Y. Pénéliou, J. M. Létang, F.-X. Hugot, **C. Le Loirec**
[ANS M&C 2021 - The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering \(Raleigh, North Carolina, 2021 October, 3rd-7th\)](#)
- "A virtual source model for Monte Carlo simulation of dismantling dose rates"
G. Lemaniry, **C. Le Loirec**
[DEM 2021 - International Conference on Decommissioning Challenges : Industrial Reality, Lessons learned and Prospects \(France, Avignon, 2021 September, 13th-15th\)](#)