

P18-2005-30

М. Райчан\*

«TRACK» — МОНТЕ-КАРЛО-КОД,  
МОДЕЛИРУЮЩИЙ СИСТЕМЫ  
ФОРМИРОВАНИЯ ПРОТОННОГО  
ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ПУЧКА

---

\* Словацкий технический университет, Братислава

<p>Райчан М. «Track» – монте-карло-код, моделирующий системы формирования протонного терапевтического пучка</p> <p>Выходящие из ускорителя протонные пучки, применяемые для терапевтических целей, необходимо модифицировать перед облучением пациента, чтобы создать требуемое пространственное распределение дозы на мишени. Малые и средние протонные поля формируются обычно применением рассеивающих фольг и коллиматоров. Нужно минимизировать потери пучка вблизи пациента. Разработана программа «Track», вычисляющая профили протонного терапевтического пучка на мишени после прохождения системой рассеивателей и коллиматоров. Представленная физическая модель применена в программе. Сравнение результатов симуляции с экспериментом показывает их хорошее совпадение. Разработанная программа представляет быстрое и эффективное средство для проектировки рассеивающих систем.</p> <p>Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова ОИЯИ.</p>	<p>P18-2005-30</p>
<p>Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005</p>	

<p>Rajcan M. «Track» — Monte Carlo Code to Model Proton Therapy Beam Modifying Systems</p> <p>Proton beams delivered by the accelerator, used for therapy, need to be modified before entering the patient in order to deliver the prescribed spatial dose distribution to the target. Small and medium proton fields are usually formed by a system of scatterers and collimators. Beam-losses in the vicinity of the patient should be minimized. «Track» — a computer code to calculate beam profiles on the target after passing through a system of scatterers and collimators — has been developed. A physical model used in the code is presented. The results of simulations are in a good agreement with the experimental data. The developed code represents the fast and effective instrument to assist the design of beam scattering systems.</p> <p>The investigation has been performed at the Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.</p>	<p>P18-2005-30</p>
<p>Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005</p>	

## **ВВЕДЕНИЕ**

Применение протонных пучков в терапии онкологических заболеваний имеет в сравнении с классической радиотерапией много преимуществ [1]. Для облучения объема опухоли однородной дозой требуется преобразование физических параметров протонного пучка, выведенного из ускорителя. В основном необходимо формировать пробег частиц пучка в теле пациента и профиль пучка. Широкое применение имеют системы формирования терапевтического пучка, включающие в себя повышающие дивергенцию пучка рассеивающие фольги, коллиматоры пучка и дрейфовые промежутки [2], их также называют рассеивающими системами. Они применяются для протонной терапии опухолей малого и среднего размера. Типично их использование в протонной терапии глаза [3]. Проектировка рассеивающей системы заключается в выборе необходимых выходных параметров терапевтического пучка и зависит от параметров пучка, входящего в систему. Одной из целей проекта системы является понижение потерь пучка вблизи пациента и образование однородного профиля пучка на мишени. Частицы, потерянные недалеко от пациента, повышают дополнительную дозу для пациента посредством вторичных частиц, а также радиационную нагрузку технического оборудования, использованного во время лечения. Поддержку проектировки представляет созданная компьютерная программа «Track», позволяющая вычислять свойства терапевтического пучка на облучаемой мишени для различных конфигураций рассеивающей системы.

Программа «Track» использует метод Монте-Карло [4], моделирующий прохождение протонного пучка сквозь рассеивающую систему, вычисляет в определенном месте профиль пучка, диаграммы эмиттанса и потери пучка на коллиматорах или элементах вакуумного канала. Существуют универсальные коды GEANT [5], SRIM [6], FLUKA [7], которым необходимо большое количество вычислительного времени. Вычисляют много лишнего для описанной выше задачи параметров. Код «Track» соединяет метод Монте-Карло с теорией многократного кулоновского рассеяния Мольера, экономит вычислительное время при сохраненной точности результатов.

### **1. РАССЕЙВАЮЩАЯ СИСТЕМА**

Рассеивающая система определена в программе «Track» последовательностью следующих частей: входной пучок, рассеивающий материал, дрейфовый

промежуток, коллиматор и мишень. Количество частей не ограничено. Отдельные части системы определены физическими параметрами, записанными во входном файле, который имеет текстовый ASCII-формат. Возможное быстрое изменение конфигурации системы.

**1.1. Симуляция входного пучка.** Пучок представлен ансамблем частиц. Каждая частица имеет координаты позиции  $(x, y)$  и угловые отклонения  $(x', y')$ . Входной пучок определен эмиттансом, максимальной шириной пучка и максимальной дивергенцией пучка. Программа вычисляет форму эмиттанса. Диаграмма эмиттанса выполнена частицами согласно конкретным правилам, изложенным ниже. Профиль пучка имеет форму распределения Гаусса. Фазовый эллипс пучка описывает уравнение [8]

$$\varepsilon = \gamma x^2 + 2\alpha x x' + \beta x'^2, \quad (1)$$

где эмиттанс пучка выражает  $\varepsilon$ , параметры эллипса  $\alpha, \beta, \gamma$ . Между параметрами действует соотношение  $\beta\gamma - \alpha^2 = 1$ . Максимальная ширина пучка  $x_{\max}$  и максимальная дивергенция пучка  $x'_{\max}$  показаны на рис. 1.

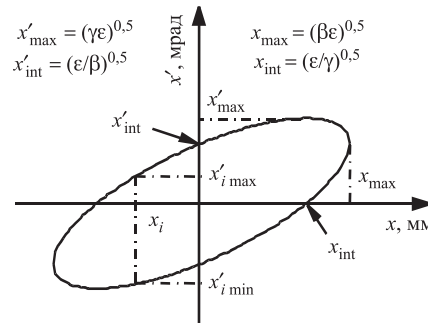


Рис. 1. Фазовый эллипс пучка в плоскости  $(x, x')$

Пользователь имеет возможность определять несколько параметров пучка в плоскости  $(x, x')$  и аналогично в плоскости  $(y, y')$ :

- максимальную ширину пучка  $x_{\max}$ ;
- $S$ , представляющее отношение  $x_{\max}/\sigma_x$ , где  $\sigma_x$  — стандартное отклонение распределения Гаусса;
- максимальное угловое отклонение частиц  $x'_{\max}$  в пучке;
- эмиттанс пучка  $\varepsilon_x$ ;
- расходимость пучка. Возможен сходящийся либо расходящийся пучок.

Центр тяжести расположения частиц в пучке нулевой. Генерация позиции частицы состоит из трех шагов:

- 1) генерация двух случайных чисел  $u_1$  и  $u_2$  из интервала  $[0, 1]$ ;
- 2) вычисление позиции частицы:  $x = \sigma_x \sqrt{-2 \ln(u_1)} \sin(2\pi \cdot u_2)$ ;

3) если условие  $|x| \leq x_{\max}$  истинное, то позиция  $x$  сопряжена с  $i$ -й частицей.

Каждой частице с позицией  $x_i$  соответствует интервал возможного углового отклонения, рис. 1:

$$x'_{i \min} \leq x'_i \leq x'_{i \max}. \quad (2)$$

Решением уравнения (1) получаем границы интервала возможных угловых отклонений:

$$x'_{i \max}/x'_{i \min} = -k \frac{\alpha}{\beta} x_i \pm \frac{1}{\beta} \sqrt{x_{\max}^2 - x_i^2}, \quad (3)$$

где сходящийся пучок имеет параметр  $k = 1$  и для расходящегося пучка  $k = -1$ . Угловые отклонения однородно распределены в интервале  $[x'_{i \min}, x'_{i \max}]$ :

$$x'_i = x'_{i \min} + (x'_{i \max} - x'_{i \min}) \cdot u, \quad (4)$$

где  $u$  — случайное число. В таком подходе все частицы располагаются внутри фазового эллипса пучка. Аналогично генерируются позиции и угловые отклонения в плоскости  $(y, y')$ , которые могут быть заданы с другими входными параметрами.

Пользователь определяет необходимое количество частиц в конце системы (на мишени), но не определяет количество частиц в пучке. Симуляция повторяется, пока необходимое количество частиц достигнет конца системы. Каждый цикл начинается с конкретным количеством частиц.

**1.2. Генератор случайных чисел.** Монте-карло-симуляция осуществляется случайной выборкой из функции плотности вероятности. Случайная переменная из неоднородного распределения может быть моделирована через подходящую трансформацию однородно распределенной случайной переменной. Существует много алгоритмов для продукции последовательности случайных переменных  $u_n$  [9]. Хороший генератор случайных переменных (RNG) должен имитировать последовательность независимых, идентично и равномерно распределенных случайных переменных на всем интервале. Качество RNG оценивается разными тестами [9, 10].

Симуляция многократного кулоновского рассеяния в различных материалах нуждается в быстрой генерации случайных переменных. Период генератора должен быть больше, чем количество случайных переменных, необходимых в симуляции, иначе результаты будут неверные. К группе стандартных генераторов RNG принадлежит многократный рекурсивный генератор (MRG) [11]. Генератор MRG третьего порядка:

$$x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + a_3 x_{n-3}) \bmod m, \quad (5a)$$

$$u_n = x_n/m, \quad (5b)$$

где  $m$  и  $k$  — положительные целые числа, коэффициенты  $a_i$  из множества  $\{0, 1, \dots, m-1\}$ . Выражение (5б) обеспечивает генерацию случайной величины из интервала  $[0, 1]$ . Лучшие свойства последовательности случайных величин обеспечим комбинацией нескольких MRG. В симуляции многократного рассеяния применен комбинированный MRG-генератор (CMRG), называемый MRG32k3a. Генератор MRG32k3a включает в себя два генератора MRG третьего порядка. Период генератора примерно  $\approx 3 \cdot 10^{57}$ .

**1.3. Рассеивающий материал.** Влияние фольги на прохождение протонов моделируется посредством теории многократного кулоновского рассеяния Мольера. Многократное кулоновское рассеяние влияет на траекторию проходящей частицы. Частица отклоняется относительно предыдущего направления движения на пространственный угол  $\theta$ , изображенный на рис. 2.

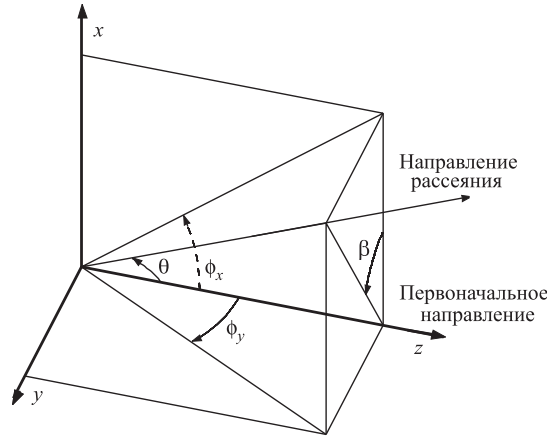


Рис. 2. Изображение полярного и азимутального углов  $\theta$ ,  $\beta$  и проекционных углов  $\phi_x$ ,  $\phi_y$ ,  $\phi_x = \tan(\theta)\cos(\beta) \approx \theta\cos(\beta)$   $\phi_y = \tan(\theta)\sin(\beta) \approx \theta\sin(\beta)$

Функция плотности распределения Мольера для углов  $\theta$  [12]:

$$F(\theta, t) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2\theta_M^2} \left[ 2e^{-\nu^2} + \frac{1}{B} F^{(1)}(\nu) + \frac{1}{B^2} F^{(2)}(\nu) + \dots \right], \quad (6)$$

где  $t$  — толщина рассеивателя;  $\theta_M$  — характеристический угол рассеяния;  $\nu$  — восстановленная угловая переменная;  $B$  — восстановленная толщина рассеивателя;  $F^{(1)}(\nu)$ ,  $F^{(2)}(\nu)$  являются выражениями разложения функции распределения. Восстановленная угловая переменная  $\nu$  определена выражением

$$\nu = \frac{\theta}{\sqrt{2}\theta_M}. \quad (7)$$

Восстановленная толщина рассеивателя  $B$  определена как корень уравнения:

$$B - \ln B = b, \quad (8)$$

где  $b$  — натуральный логарифм эффективного количества событий рассеяния, вычисленный в [12, 13].

Выражения развития  $F^{(1)}(\nu)$ ,  $F^{(2)}(\nu)$  отражают кривые на рис. 3 и определяются как

$$F^{(n)}(\nu) = \frac{1}{n!} \int_0^\infty \eta d\eta J_0(\nu\eta) \exp(-\eta^2/4) \left( \frac{\eta^2}{4} \ln \frac{\eta^2}{4} \right)^n, \quad (9)$$

где  $J_0(\nu\eta)$  — функция Бесселя:

$$J_0(\nu\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\left(\frac{1}{4}(\nu\eta)^2\right)^k}{(k!)^2}. \quad (10)$$

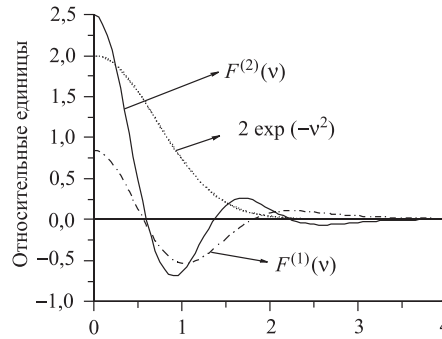


Рис. 3. Функции  $2\exp(-\nu^2)$ ,  $F^{(1)}(\nu)$ ,  $F^{(2)}(\nu)$  в зависимости от восстановленной угловой переменной  $\nu$

Первым членом разложения функции  $F(\theta, t)$  (6) является нормальное распределение Гаусса, следующие два члена вычислены в программе «Track» и выражены в табличной форме.

С помощью инверсионной кумулятивной функции распределения [4] каждой частице присвоен угол отклонения  $\theta$ , получаемый из функции распределения (6). Пример вычисленной кумулятивной функции распределения  $cdf(\theta)$  в зависимости от угла отклонения  $\theta$  протонов при прохождении танталовой фольги различных толщин и техника выбора углов отклонения приведены на рис. 4. Горизонтальные и вертикальные проекции угла отклонения  $\theta$  добавлены к горизонтальной и вертикальной диаграмме эмиттанса.

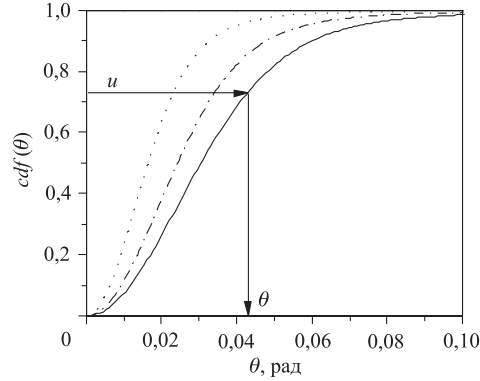


Рис. 4. Кумулятивная дистрибутивная функция  $cdf(\theta)$  вычислена для протонов энергии 72 МэВ, проходящих танталовую фольгу разной толщины. Техника преобразования однородно распределенной случайной переменной  $u$  из интервала  $[0, 1]$  на угловое отклонение  $\theta$  протона. Толщина фольги:  $\cdots$  100 мкм;  $\cdot - \cdot$  200 мкм;  $—$  300 мкм

В начале запуска программы вычисляются таблицы кумулятивных дистрибутивных функций для всех рассеивающих материалов вдоль протонного пучка, что в дальнейшем ускоряет процесс симуляции. Во время прохождения протонов сквозь рассеиватель уменьшается кинетическая энергия протонов. Программа вычисляет изменение средней кинетической энергии, используя таблицы зависимости пробега  $R[\text{г/см}^2]$  протонов в конкретном материале от кинетической энергии  $E_{\text{kin}}$  [МэВ] протонов [14, 15]. Представим влияние 100 мкм толстой алюминиевой фольги на входной протонный пучок энергии 72 МэВ с эмиттансом  $5 \text{ мм} \times 5 \text{ мрад}$ . Рис. 5 представляет диаграмму эмиттанса непосредственно на входе фольги. Пучок после рассеяния на выходе из фольги показан на рис. 6. Очевидно, позиции частиц не изменились, углы движения частиц увеличились за счет влияния рассеяния. Суммарная расходимость пучка возрастает.

Толстые слои рассеивателя в процессе симуляции автоматически разделены на части, толщина которых образует геометрический ряд [13]:

$$t_n = \kappa R (1 - \kappa)^{n-1}, \quad (11)$$

где  $t_n$  — толщина  $n$ -го слоя;  $R$  — пробег протонов при входной энергии в материале рассеивателя. Оптимальная величина константы  $\kappa = 0,375$  обеспечит максимальное количество слоев восемь с суммарной толщиной  $t$ , которая удовлетворяет условию  $t/R \leq 0,97$ . Для более толстых слоев теория Мольера недействительна.



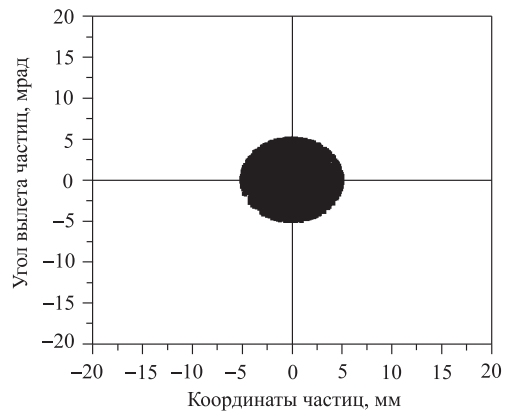


Рис. 5. Диаграмма эмиттанса входного пучка

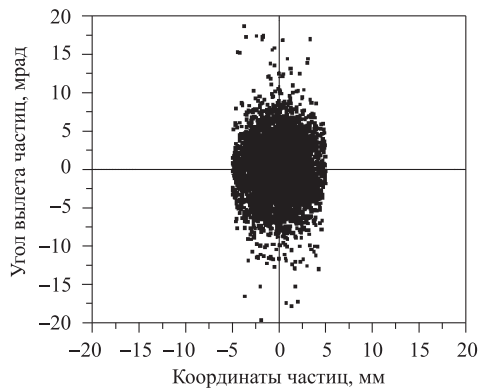


Рис. 6. Диаграмма эмиттанса рассеянного пучка

**1.4. Дрейфовый промежуток.** Дрейфовый промежуток представляет собой часть системы формирования пучка, где частицы движутся в вакууме без воздействия внешних сил. Позиции частиц трансформируются следующим образом:

$$x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + x'_{\text{old}}L, \quad x'_{\text{new}} = x'_{\text{old}}, \quad y_{\text{new}} = y_{\text{old}} + y'_{\text{old}}L, \quad y'_{\text{new}} = y'_{\text{old}}, \quad (12)$$

где  $L$  — длина дрейфового промежутка;  $x_{\text{new}}, y_{\text{new}}, x'_{\text{new}}, y'_{\text{new}}$  — координаты частиц в конце пространства дрейфа; и  $x_{\text{old}}, y_{\text{old}}, x'_{\text{old}}, y'_{\text{old}}$  — координаты частиц в начале дрейфового промежутка.

Рис. 7 изображает упомянутый выше пучок в конце дрейфового промежутка, в 1 м за алюминиевой фольгой рассеивателя. Углы движения частиц остались неизменными в дрейфовом пространстве. Позиции частиц изменились относительно их углов.

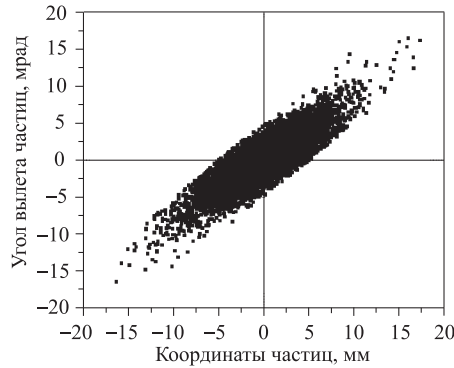


Рис. 7. Диаграмма эмиттанса рассеянного пучка после прохождения дрейфового промежутка длиной 1 м

**1.5. Коллиматор.** Коллиматор определен длиной  $L$  и апертурой  $D$ . Программа выделяет частицы, которые проходят вне апертуры в начале и в конце коллиматора. Критерий выделения:

$$x^2 + y^2 \geq D^2/4, \quad (13)$$

где  $x$  и  $y$  — координаты частиц. Эти частицы устраняются из ансамбля частиц, образующих пучок. Остальные частицы транспортируются к концу коллиматора в соответствии с трансформацией (12), используется одинаковый критерий выделения (13). Этим способом автоматически выделяются из пучка частицы, которые столкнулись со стенами коллиматора. Программа сохраняет количество потерянных частиц с целью вычислить потери пучка вдоль системы формирования пучка. Рис. 8 показывает влияние коллиматора ( $D = 10$  мм,  $L = 300$  мм) на предыдущий пучок (рис. 6).

**1.6. Мишень.** Мишень в системе формирования пучка представляет позицию, где вычисляются выходные параметра пучка. Позиция мишени определена пользователем. Программа вычисляет диаграммы горизонтального и вертикального эмиттанса и сохраняет информацию о потерях пучка на коллиматорах. Горизонтальные и вертикальные профили пучка вычисляются из диаграмм эмиттанса.

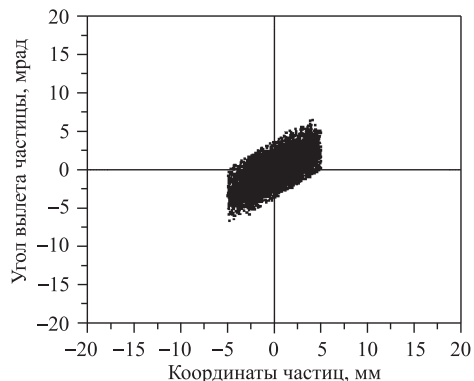


Рис. 8. Диаграмма эмиттанса пучка в конце коллиматора

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Алгоритм программы «Trask» использует технику Монте-Карло с теорией многократного кулоновского рассеяния Мольера, экономит вычислительное время в сравнении с чистым подходом Монте-Карло. Физический и математический подход, примененный в программе, верифицирован экспериментально и определена точность результатов.

Эксперименты рассеяния протонного пучка с энергией 175 МэВ проведены на фазотроне ЛЯП ОИЯИ в Дубне. Схема экспериментальной установки дана на рис.9. Начало симуляции — в позиции, где известны параметры

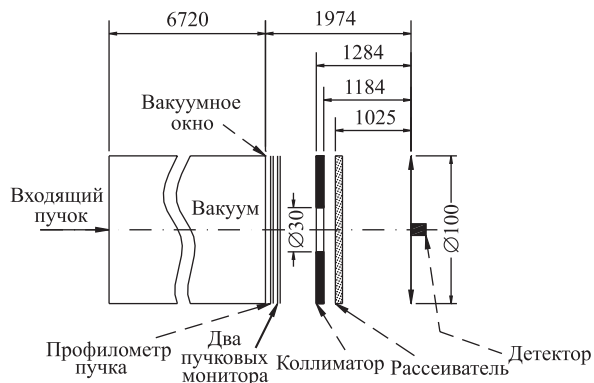


Рис. 9. Экспериментальная установка для измерения рассеяния протонного пучка

входного пучка. Пучок проходил сквозь выходное вакуумное окно, профилометр пучка, две мониторные ионизационные камеры и коллиматор диаметром

30 мм. Вдоль пучка устанавливались разные рассеивающие материалы (свинец и плексиглас) различных толщин (от 0,1 до 3,16 г/см<sup>2</sup>). В конце системы измерялся профиль пучка с помощью кремниевого детектора на расстоянии 102,5 см от рассеивателя. Экспериментально измеренные и смоделированные профили пучка аппроксимированы кривой Гаусса. Сравнивались их стандартные отклонения  $\sigma_{\text{exp}}$  и  $\sigma_{\text{sim}}$ . Результаты сравнения показаны в таблице. Значения рассеяния в симуляции примерно на 5,5% меньше по сравнению с экспериментом. Отличие результатов эксперимента от симуляции вызвано погрешностью определения эмиттанса входного пучка, который может отличаться от эллиптической формы, включенной в модель. В том числе в модели не учтено рассеяние протонов на стенках коллиматора.

**Таблица. Результаты эксперимента и симуляции многократного кулоновского рассеяния протонного пучка энергии 175 МэВ, проходящего через свинец и плексиглас. Сравнены стандартные отклонения  $\sigma$  измеренных и смоделированных профилей пучка.**

#### Свинец

Толщина, г/см <sup>2</sup>	Эксперимент, $\sigma$ , мм	Симуляция, $\sigma$ , мм	$D_{\sigma}$ , %
0,1	12,9	12,3	-4,7
0,2	13,8	13,0	-5,8
0,3	14,7	13,9	-5,4
0,4	15,6	14,7	-5,8
0,5	16,4	15,6	-4,9

#### Плексиглас

Толщина, г/см <sup>2</sup>	Эксперимент, $\sigma$ , мм	Симуляция, $\sigma$ , мм	$D_{\sigma}$ , %
1,57	13,6	12,9	-5,1
3,16	15,7	15,3	-2,5

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описан компьютерный код «Task». Код способствует проектированию рассеивающих систем для протонных терапевтических пучков. Проверялась верность физической модели, примененной в программе, сравнением с экспериментально измеренными данными. Комбинация техники Монте-Карло с аналитической теорией Мольера представляет правильный подход к быстрой симуляции многократного кулоновского рассеяния. Сохраняется

необходимая точность результатов симуляции и сокращается вычислительное время в сравнении с чистым подходом Монте-Карло.

Код применяется при проектировании и оптимизации транспортировки терапевтического протонного пучка для терапии глаза, которая планируется в Циклотронном центре Словацкой Республики. Оптимизация сводится к вычислению влияния толщин рассеивающих материалов вдоль пучка, длин и апертур коллиматоров, а также их позиций.

#### **Благодарности**

Поддержка в инициализации этой работы была оказана ОИЯИ и Словацким министерством образования (VEGA 1/0274/03). Особенно хотелось бы выразить благодарность А.Г. Молоканову и И.В. Мирохину за помощь автору, при создании этой работы.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. *Wilson R. R.* Radiological use of fast protons // *Radiology*. 1946. V. 47. P. 487–491.
2. *Koehler A. M., Schneider R. J., Sisterson J. M.* Flattening of proton dose distributions for large-field radiotherapy // *Med. Phys.* 1977. V. 4. P. 297–301.
3. *Касперек А.* Review of proton ophthalmological treatment facilities // Scientific Report No. СУС/ССО/01/95. Douglas Cyclotron Unit, Clatterbridge Centre for Oncology, 1995. P. 1–16.
4. *Bielajew A. F.* Fundamentals of Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport. The University of Michigan, 2001.
5. *Agostinelli S. et al.* GEANT4 — a simulation toolkit // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A*. 2003. V. 506. P. 250–303.
6. *Biersack J. P., Haggmark L. G.* A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets // *Nucl. Instr. Meth.* 1980. V. 174. P. 257–269.
7. *Fasso A., Ferrari A., Ranft J., Sala P. R.* FLUKA: Status and Prospective for Hadronic Applications, Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference. Lisbon, October 23–26, 2000.
8. *Штеффен К.* Оптика пучков высокой энергии. М.: Мир, 1969.
9. *L'Ecuyer P.* Software for Uniform Random Number Generation: Distinguishing the Good and the Bad. Proceedings of the 2001 Winter Simulation Conference. IEEE Press, Dec. 2001. P. 95–105.
10. *L'Ecuyer P., Hellekalek P.* Random Number Generators: Selection Criteria and Testing in Random and Quasi-Random Point Sets, Lectures Notes In Statistics, No. 138. Springer, 1998. P. 223–266.

11. *L'Ecuyer P.* Good Parameter Sets for Combined Multiple Recursive Random Number Generators // Shorter Version in Operations Research, 1999. V. 47/1. P. 159–164.
12. *Scott W. T.* The Theory of Small-Angle Multiple Scattering of Fast Charged Particles // Rev. Mod. Phys. 1963. V. 35/2. P. 231–313.
13. *Gottschalk B., Koehler A. M., Schneider R. J., Sisterson J. M., Wagner M. S.* Multiple Coulomb scattering of 160 MeV protons // Nucl. Instr. Meth. B. 1993. V. 74. P. 467–490.
14. *Berger M. J.* ESTAR, PSTAR and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons and Helium Ions, Technical Report NBSIR 4999 National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 1993.
15. Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles, ICRU-Report 49, International Commission on Radiation Units and Measurements, 1993.

Получено 16 марта 2005 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 22.06.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 0,82. Тираж 260 экз. Заказ № 54928.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)