
УДК 621.039.52:615.849.1

А.Н. Соловьев^{1,2}, аспирант, **В.В. Федоров**¹, канд. техн. наук,
В.И. Потетня¹, канд. биол. наук, **В.В. Нечаев**², д-р физ.-мат. наук

¹ Медицинский радиологический научный центр им. А.Ф. Цыба – Филиал государственного бюджетного учреждения «Федеральный медицинский исследовательский центр им. П.А. Герцена» Министерства здравоохранения Российской Федерации (Россия, Калужская область, 249036, Обнинск, ул. Жукова, 10, salonf@mirc.obninsk.ru, mrvvf@yandex.ru, potetnya@mirc.obninsk.ru),

² Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики (Россия, 119454, Москва, пр-т Вернадского, д.78, тел.(499) 4347447, 4349154, e-mail: nechaev@mirea.ru)

Особенности моделирования адронных взаимодействий с помощью GEANT4 при решении задач лучевой терапии

Рассмотрены особенности моделирования взаимодействий адронного излучения и вещества для решения задач лучевой терапии. Представлено программное обеспечение на языке Python и набор классов на языке C++ для эффективного управления адронными взаимодействиями в модельных задачах. Разработанные средства применены для оценки действия нейтронного излучения с энергиями 14.5 ± 1 МэВ.

Розглянуто властивості моделювання взаємодії адронного випромінювання і речовини для розв'язування задач променевої терапії. Розроблено програмне забезпечення мовою Python і набір класів мовою C++ для ефективного управління адронними взаємодіями в модельних задачах. Розроблені засоби застосовано для оцінки дії нейтронного випромінювання з енергіями 14.5 ± 1 МеВ.

Ключевые слова: адронная терапия, Geant4, лучевая терапия, метод Монте-Карло.

Адронная лучевая терапия — один из видов дистанционной радиотерапии для лечения онкологических заболеваний с применением пучков протонов, нейтронов или ионов [1]. Преимуществом адронной терапии являются уникальные физические и радиобиологические свойства этих частиц: они могут проникать внутрь ткани и выгружать максимальную энергию в локализованной точке пространства перед тем как остановиться, при этом в точке выгрузки пучка их относительная биологическая эффективность, в отличие от гамма-излучения, больше единицы. Адроны имеют огромный потенциал при облучении радиорезистентных опухолей [2].

© А.Н. Соловьев, В.В. Федоров, В.И. Потетня, В.В. Нечаев, 2015

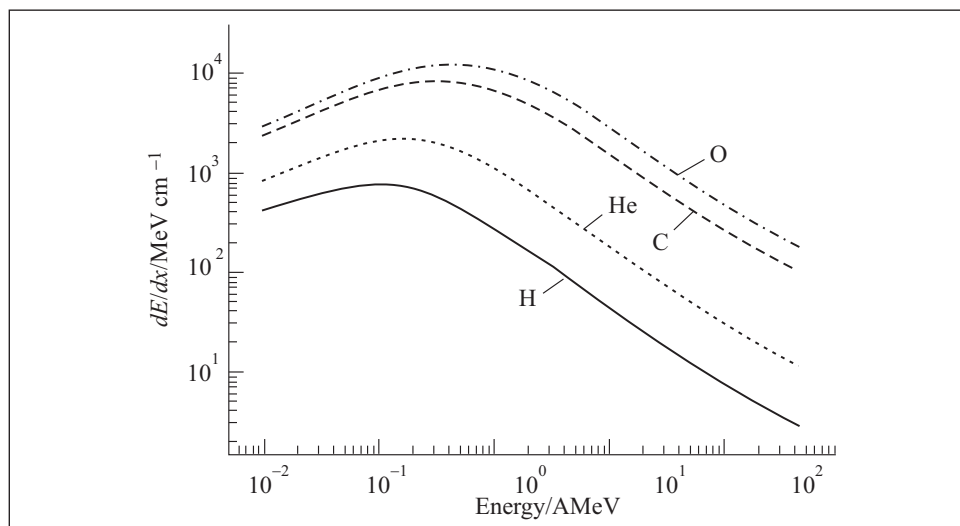


Рис. 1

Основная сложность при моделировании физических процессов взаимодействия адронов с веществом для задач ядерной медицины связана с тем, что помимо оценки величины физической поглощенной дозы необходимо оценивать и величину относительной биологической эффективности (ОБЭ). При этом величина ОБЭ зависит от величины линейной передачи энергии (ЛПЭ), которая, в свою очередь, зависит от типа частицы и от ее энергии [3—5]. На рис. 1 показана зависимость ЛПЭ от кинетической энергии для различных частиц, а на рис. 2 — зависимость ОБЭ от ЛПЭ, где ρ , α , C, O — частицы ионизирующего излучения. Подробно задача моделирования взаимодействия ионизирующего излучения и вещества рассмотрена в [6].

Важной особенностью является тот факт, что Geant4 предоставляет много альтернативных физических моделей, из которых пользователь может выбрать наиболее соответствующие его задаче, т.е. пользователь (программист) ответственен за выбор адекватного набора физических процессов и моделей [7]. В результате проведенного исследования физических моделей взаимодействия нейтронов энергии $14,5 \pm 1$ МэВ разработаны методики, которые могут быть применены для моделирования и других физических процессов, в частности при облучении на протонном и ионном ускорителях.

Средства и методы. Основное программное средство моделирования физических взаимодействий — Geant4-10.0 [8] без установленных патчей. Данная версия поддерживает мультипроцессорный режим работы на уровне ядра, что возможно только под управлением ОС Linux. В настоя-

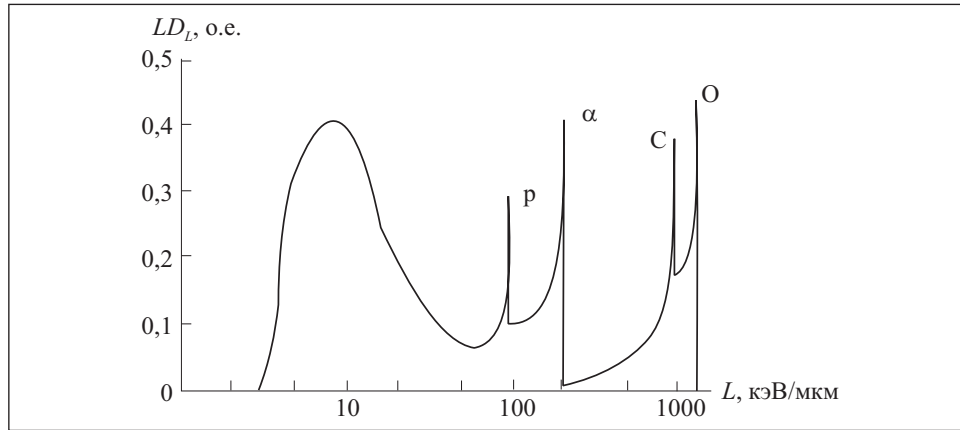


Рис. 2

Таблица 1

Вторичная частица	Реакция	$E_n = 0,5$	$E_n = 5$	$E_n = 9$	$E_n = 14,5$	$E_n = 19,5$
Протоны	$H(n, n)H$	93,6	88,2	83	71,6	65,7
	$^{16}O(n, p)^{16}N$				1,0	1,1
	$^{14}N(n, n', p)^{13}C$				0,2	0,5
	$^{16}O(n, n', p)^{15}N$				0,1	3,7
α	$^{12}C(n, \alpha)^9Be$			0,7	0,7	0,5
	$^{16}O(n, \alpha)^{13}C$		2,4	3,3	5,2	1,1
	$^{16}O(n, n', \alpha)^{12}C$				4,5	9,1
	$^{12}O(n, n')3\alpha$				2,0	3,7
C	$^{12}C(n, n)^{12}C$	1,4	1,4	1,1	1,0	1,0
	$^{16}O(n, \alpha)^{13}C$		1,0	1,4	2,1	0,4
	$^{16}O(n, n', \alpha)^{12}C$				2,5	4,7
N	$^{16}O(n, n', p)^{15}N$				0,1	1,5
O	$^{16}O(n, n)^{16}O$	1,6	6,1	4,9	3,4	3,4
	$^{16}O(n, n')^{16}O$				1,8	0,6
e^+e^-	$^{16}O(n, n')^{16}O$			2,6	1,7	0,6
Разное		0,4	0,9	1,6	2,4	2,4

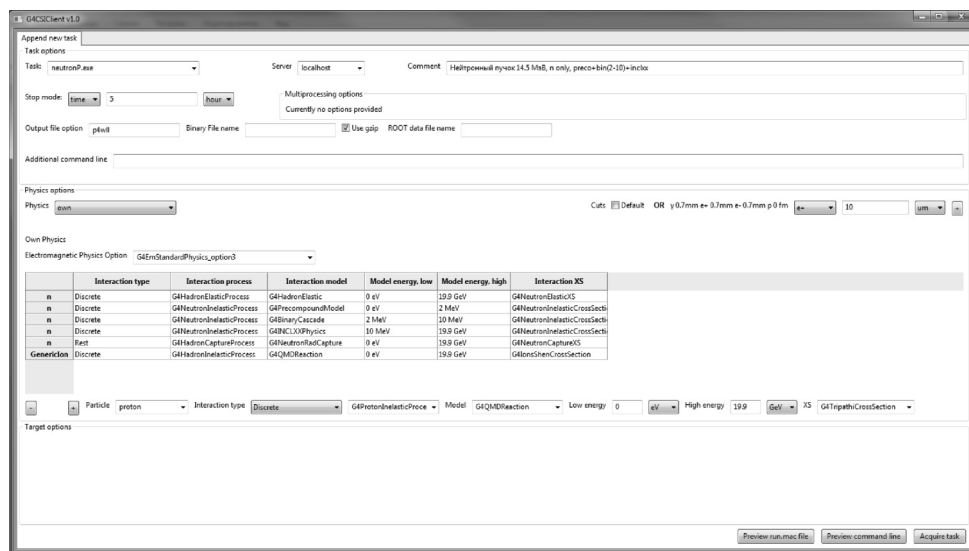


Рис. 4

щее время используется ОС MS Windows, поэтому весь код запускался в последовательном режиме (sequential mode) на машине с 8xIntel Xeon E5506 2.13 ГГц. При этом использована возможность выполнения нескольких задач параллельно.

Для оценки величин поглощенной энергии результаты моделирования выводились в собственном формате, для оценки спектров был использован формат, принятый программным средством ROOT [9].

Модельный эксперимент представлял собой обобщенную модель монослоя клеток толщиной 1 мкм, представленный тканеэквивалентным материалом, над которым со стороны хода пучка находился слой воды 2,5 мм. В этих условиях при энергии падающих нейтронов 14,5 МэВ в слое наблюдается так называемое протонное равновесие. На рис. 3 (см. вклейку) представлена схема модельного эксперимента, где желтым цветом показана вода, зеленым — слой тканеэквивалентного материала, розовые линии — первичный пучок, желтые линии — вторичное излучение.

В табл. 1 приведены величины вкладов вторичных частиц при облучении нейтронами различных энергий [10, 11].

Результаты. Поскольку Geant4 по умолчанию не позволяет управлять физическими взаимодействиями без перекомпиляции программы, были созданы программные средства, позволившие устранить этот недостаток.

- Определен формат файла-описания адронных физик (абстрактное описание электромагнитных физик на данном этапе не представляется возможным, поэтому были исследованы готовые конструкторы: G4Em-

LivermorePhysics, G4EmPenelopePhysics, G4EmStandartPhysics_optionX (где $X — 1 \div 4$), G4_EmLowEPPhysics). Выбран формат JSON.

- Класс на C++, наследованный от G4VPhysicsConstructor, читающий указанный формат файла с использованием библиотеки boost [10] и создающий эквивалентное представление процессов и моделей для указанных частиц в соответствии с заданными параметрами.

- Программа на языке Python для эффективного управления расчетными заданиями, позволяющая создавать указанные файлы и управлять указанными параметрами величин отсечек (cut, подробно в [5, 6]), параметрами запуска (число историй либо время расчета, имена выходных файлов и др.). Общий вид разработанной программы представлен на рис. 4.

В табл. 2 приведены результаты моделирования различных физических параметров и процентные доли вкладов протонов всех реакций, альфа-частиц всех реакций, суммарного вклада тяжелых ионов от всех реакций и электронов, а также суммарная поглощенная доза от одной частицы $\left(\frac{\Sigma D}{nps}\right)$

при облучении 1 мкм тканеэквивалентного материала под 2,5 мм воды.

Таблица 2

Тип физического параметра	Протоны	Альфа-частицы	Тяжелые ионы	Электроны	Доза на одну частицу источника, МэВ
Caswell [11]	72,9	12,4	10,9	1,7	
<i>Стандартные физические параметры</i>					
QGSP_BIC, QGSP_BIC_HP	69,4; 59,1	2,0; 5,0	7,0; 20,0	15,3; 14,6	$8,36 \cdot 10^{-5}$; $9,15 \cdot 10^{-5}$
FTFP_BERT, FTFP_BERT_HP	70,2; 64,0	3,0; 5,0	9,6; 15,7	15,3; 14,7	$8,5 \cdot 10^{-5}$; $8,31 \cdot 10^{-5}$
QGSP_INCLXX	74,1	2,9	5,8	16,4	$8,17 \cdot 10^{-5}$
<i>Управляемые физические параметры</i>					
em: Livermore, n _{el} : CHIPS, n _{inel} : Bertini	69	1,9	10,1	17,3	$8,71 \cdot 10^{-5}$
em: standart_03, n _{el} : HadronEl, n _{inel} : Bertini	68,9	2,9	5,0	17,0	$8,11 \cdot 10^{-5}$
em: standart_03, n _{el} : HadronEl, n _{inel} : Bertini <10, MeV, INCLXX	71,4	2,28	6,6	17,8	$8,38 \cdot 10^{-5}$

Промоделировано более двухсот комбинаций физических параметров. Разработанный программный код и полная таблица результатов моделирования может быть найдена в составе разрабатываемой системы планирования лучевой терапии в репозитории git [12]. Полученные спектры излучения вторичных протонов и альфа-частиц в детекторе представлены соответственно на рис. 5, а и б (см. вклейку).

На рис. 6 (см. вклейку) представлена гистограмма скорости моделирования при различных физических параметрах, где число историй источника измерялось при одинаковом времени расчета — 18 ч.

Выводы

По результатам проведенного моделирования нейтронного пучка $14,5 \pm 1$ МэВ с различными физическими моделями, параметризация которых осуществлялась разработанным программным кодом, можно сделать следующие выводы.

Все существующие параметрические модели занижают вклад α -частиц и завышают вклад электронов. Это можно объяснить особенностями моделирования процессов в Geant4, так как для тяжелых частиц основным взаимодействием с веществом является взаимодействие с электронами в ядерной оболочке мишени.

Самой быстрой и точной моделью электромагнитной физики является модель Livermore, занижающая вклады тяжелых частиц на 30—60 %. Менее быстрой, но более адекватной по точности моделью, является Standart-Physics_Option3.

НР-модели позволяют существенно сократить скорость расчетов: если отключить адронные взаимодействия вторичных частиц и оставить только нейтроны (что допустимо при применении других моделей), то доля дозы, доставляемой протонами, сокращается на 15—20 %.

Модель упругих взаимодействий CHIPS в среднем обеспечивает вклад протонов на 5—10 % меньше, чем модель G4HadronElastic. Модели упругих взаимодействий BarashekovGlauber, DiffuseElastic и другие применимы для частиц с энергией от 1 ГэВ и выше, т.е. не подходят для данной задачи.

Все существующие модели неупругих взаимодействий (Binary Cascade, Bertini Cascade, INCLXX, PRECO) могут применяться для данной задачи. Применение нескольких моделей при неперекрывающихся границах в ряде случаев имеет большее быстродействие, нежели одиночная модель на всем интервале. Наиболее оптимальным является применение Binary Cascade до 10 МэВ и INCLXX после 10 МэВ. Binary Cascade может быть дополнен PRECO для энергий до 2 МэВ. Однако необходимо учитывать тот факт, что практическая верификация этих моделей на низких энергиях

не проводилась. Она достаточно затруднительна, поэтому в будущем эти результаты могут измениться.

Разработанное программное обеспечение позволяет несколько ускорить процесс создания модельных задач при учете протекающих физических процессов и оценке адекватности получаемой модели. В будущем возможно создание базы данных оптимальных физических моделей для аналогичных и подобных задач (например, при оценке действия протонных и ионных пучков в клинических задачах, при постановке или анализе экспериментов). Это позволит снизить порог вхождения в средства программного моделирования, а также оптимизировать скорость модельных расчетов.

Полученные результаты моделирования терапевтической нейтронной задачи могут быть успешно применены при создании системы планируемой нейтронной терапии [13].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Википедия* — Свободная энциклопедия [Электронный ресурс] = Wikipedia, the free encyclopedia [200-?] — Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org>, <http://en.wikipedia.org>.
2. *Труфанов Г.Е., Асатурян М.А., Жаринов Г.М.* Лучевая терапия. Том 2. — М. : Изд. группа ГЭОТАР-Медиа, 2007.
3. *Беспалов В.И.* Взаимодействие ионизирующих излучений с веществом: Учеб. пособие. Изд. 4. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. — 369 с.
4. *Sinclair Dr. W. K. et al* (January 2003). «Relative biological effectiveness (RBE), quality factor (Q) and radiation weighting factor (W_r)». *Annals of the ICRP* 33 (4). ISBN 978-0-08-044311-9. ICRP Publication 92.
5. *Попов В.И.* Методы ЛПЭ-спектрометрии ионизирующих излучений. — М. : Атомиздат, 1978. — 136 с.
6. *Соловьев А.Н.* Компьютерное моделирование взаимодействия ионизирующего излучения и вещества // Информ. и телекоммуникационные технологии. — 2013. — № 20. — С. 35—43.
7. *Asai M.*, I Kernel // *Geant4 Tutorial Course*, SLAC, 2014.
8. *GEANT4 Simulation code. Introduction to GEANT4, user documentation* [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://geant4.web.cern.ch/>.
9. *ROOT | A Data Analysis Framework* [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://root.cern.ch/>
10. *Caswell R.S., Coyne J.J.* Interaction of Neutrons and Secondary Charged Particles with Tissue: Secondary Particle Spectral // *Radiation research*. — 1972. — No 52. — P. 448—470.
11. *Caswell R.S., Coyne J.J., Randolph M.L.* Kerma Factors of Elements and Compounds for Neutron Energies Below 30 MeV // *Int. J. Appl. Radiat. Isov.* — 1982. — V. — P. 227—250.
12. <http://bitbucket.org/mrrc/npplan>
13. *Соловьев А.Н.* Автоматизированная распределенная система планирования лучевой терапии // Информ. и телекоммуникационные технологии. — 2013. — №17. — С. 48—60.

A.N. Solovev, V.V. Fedorov, V.I. Potetnya, V.V. Nechaev

MODELING PECULIARITIES OF HADRONS INTERACTIONS FOR SOLVING THE PROBLEMS OF RADIATION TREATMENT USING GEANT4

This paper represents several issues for hadron-matter interaction for solving radiation treatment problems. The authors have developed a software using Python and a set of classes using C++ for effective hadron interaction control in the model tasks. The developed software was used for evaluation of the effect of neutron beams with 14.5 ± 1 MeV energies.

Key words: hadron therapy, Geant4, radiation therapy, Monte-Carlo method.

REFERENCES

1. "Wikipedia — The free encyclopedia" (200-?), available at: <http://ru.wikipedia.org>, <http://en.wikipedia.org>.
2. Trufanov, G.E., Asaturyan, M.A. and Zharinov, G.M. (2007), *Luchevaya terapiya, Tom 2* [Radiotherapy, Vol. 2], Izd. Gruppya GEOTAR-Media, Moscow, Russia.
3. Bespalov, V.I. (2008), *Vzaimodeistvie ioniziruyushchikh izlucheny s veshchestvom: Ucheb. Posobiye, Izd. 4* [Interaction of ionizing radiations with substance: Manual, Publ. 4], Izd-vo Tomskogo politekhnicheskogo universiteta, Tomsk, Russia.
4. Sinclair, Dr.W.K. (2003), Relative biological effectiveness (RBE), quality factor (Q) and radiation weighting factor (Wr), *Annals of the ICRP*, 33 (4), ICRP Publication 92.
5. Popov, V.I. (1978), *Metody LPE-spectrometrii ioniziruyushchikh izlucheny* [Methods of LPE-spectrometry of ionizing radiations], Atomizdat, Moscow, Russia.
6. Solovyov, A.N. (2013), "Computer modeling of interaction of ionizing radiation and substance", *Inform. i telekommunikatsionnye tekhnologii*, no. 20, pp. 35-43.
7. Asai, M. (2014), Kernel, part I, Geant4 Tutorial Course, SLAC.
8. GEANT4 Simulation code. Introduction to GEANT4, user documentation, available at: <http://geant4.web.cern.ch/>.
9. ROOT | A Data Analysis Framework, available at: <http://root.cern.ch/>, free.
10. Caswell, R.S. and Coyne, J.J. (1972), "Interaction of Neutrons and Secondary Charged Particles with Tissue: Secondary Particle Spectral", *Radiation research*, Vol. 52, pp. 448-470.
11. Caswell, R.S., Coyne, J.J. and Randolph, M.L. (1982), "Kerma Factors of Elements and Compounds for Neutron Energies Below 30 MeV", *Int. J. Appl. Radiat. Isov.*, Vol. ?, pp. 227-250.
12. Available at: <http://bitbucket.org/mrrc/npplan>
13. Solovyov, A.N. (2013), "Automated distributed system of planning radiation therapy", *Inform. i telekommunikatsionnye tekhnologii*, no. 17, pp. 48-60.

Поступила 14.01.15

СОЛОВЬЕВ Алексей Николаевич, инженер Медицинского радиологического научного центра им. А.Ф. Цыба — филиал государственного бюджетного учреждения «Федеральный медицинский исследовательский центр им. П.А. Герцена» Министерства здравоохранения Российской Федерации, аспирант Московского государственного технического университета радиотехники, электроники и автоматики, который окончил 2012 г. Область научных исследований — информационные технологии в биологии и ядерной медицине, математическая физика, математические методы и пакеты в физических и радиобиологических задачах, нейросети и нейросетевые алгоритмы, обработка медицинских изображений.

ФЕДОРОВ Владимир Викторович, канд. техн. наук, инженер Медицинского радиологического научного центра им. А.Ф. Цыба — филиал государственного бюджетного учреждения «Федеральный медицинский исследовательский центр им. П.А. Герцена» Министерства здравоохранения Российской Федерации. В 1975 г. окончил Обнинский филиал Московского инженерно-физического ин-та. Область научных исследований — биофизика.

ПОТЕТНЯ Владимир Иванович, канд. биол. наук, вед. науч. сотр. Медицинского радиологического научного центра им. А.Ф. Цыба — филиал государственного бюджетного учреждения «Федеральный медицинский исследовательский центр им. П.А. Герцена» Министерства здравоохранения Российской Федерации. В 1970 г. окончил Харьковский госуниверситет. Область научных исследований — биофизика, биомедицинская инженерия.

НЕЧАЕВ Валентин Викторович, академик РАН, д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой «Интеллектуальные технологии и системы» Московского государственного технического университета радиотехники, электроники и автоматики. В 1967 г. окончил Московский энергетический ин-т. Область научных исследований — математическое и компьютерное моделирование сложных систем.