

SPEEDO:一款快速准确的碳离子蒙特卡罗剂量计算程序

吴晋¹, 李仕军¹, 王誉鑫¹, 常艳奎¹, 裴曦², 陈志¹, 陈卫强³, 李强³, 徐榭^{1,4}

1. 中国科学技术大学核科学技术学院, 安徽 合肥 230026; 2. 安徽慧软科技有限公司, 安徽 合肥 238000; 3. 中国科学院近代物理研究所, 甘肃 兰州 730099; 4. 中国科学技术大学附属第一医院放疗科, 安徽 合肥 230026

【摘要】目的:开发一款用于碳离子治疗的快速准确的蒙特卡罗程序SPEEDO。**方法:**对于电磁过程,采用连续慢化近似的II类浓缩历史模拟方案,模拟能量歧离、射程歧离、多重散射和电离过程。对于核相互作用,本研究考虑5种靶核:氢、碳、氮、氧和钙。产生的次级带电粒子遵循同样的浓缩历史框架。本研究模拟碳离子在4种材料(水、软组织、肺和骨头)中的输运过程,并将计算的剂量结果与放射治疗物理专用蒙特卡罗模拟软件TOPAS进行对比验证,最后与在武威重离子治疗中心医用重离子加速器示范装置(HIMM-WW)上测得的水箱剂量进行对比。**结果:**SPEEDO的模拟结果与TOPAS具有良好的一致性。对于每种材料在物理剂量大于其体素最大剂量点10%的体素区域,两者的相对最大剂量平均误差均小于2%。在治疗能量为400 MeV/u时,SPEEDO的计算时间(13.8 min)明显小于TOPAS的计算时间(105.0 min)。SPEEDO的计算结果与HIMM-WW的测量值在横向剂量分布和积分剂量深度曲线方面展现出良好的一致性。**结论:**SPEEDO程序可以准确快速地实现碳离子的蒙特卡罗剂量计算。

【关键词】碳离子治疗;蒙特卡罗;电磁过程;核相互作用

【中图分类号】R318;R811.1

【文献标志码】A

【文章编号】1005-202X(2024)10-1189-10

SPEEDO: a rapid and accurate Monte Carlo dose calculation program for carbon ion therapy

WU Jin¹, LI Shijun¹, WANG Yuxin¹, CHANG Yankui¹, PEI Xi², CHEN Zhi¹, CHEN Weiqiang³, LI Qiang³, XU Xie George^{1,4}

1. School of Nuclear Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China; 2. Anhui Wisdom Technology Company Limited, Hefei 238000, China; 3. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730099, China; 4. Department of Radiotherapy, the First Affiliated Hospital of University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

Abstract: Objective To develop a rapid and accurate Monte Carlo program (simplified code for dosimetry of carbon ions, SPEEDO) for carbon ion therapy. **Methods** For electromagnetic process, type II condensed history simulation scheme and continuous slowing down approximation were used to simulate energy straggling, range straggling, multiple scattering, and ionization processes. For nuclear interaction, 5 types of target nuclei were considered, including hydrogen, carbon, nitrogen, oxygen, and calcium. The produced secondary charged particles followed the same condensed history framework. The study simulated the transport of carbon ions in 4 materials (water, soft tissues, lung, and bone), and the calculated doses were validated against TOPAS (a Monte Carlo simulation software for radiotherapy physics), followed by a comparison with dose measurements in a water phantom from the HIMM-WW (a medical heavy-ion accelerator facility in Wuwei). **Results** SPEEDO's simulation results showed good consistency with TOPAS. For each material, in the voxel region where the physical dose was greater than 10% of the maximum dose point, the relative maximum dose error of both was less than 2%. At treatment energy of 400 MeV/u, SPEEDO's computation time was significantly less than that of TOPAS (13.8 min vs 105.0 min). SPEEDO's calculation results also showed good agreement with HIMM-WW measurements in terms of lateral dose distribution and integrated dose depth curve. **Conclusion** SPEEDO program can accurately and rapidly perform Monte Carlo dose calculations for carbon-ion therapy.

Keywords: carbon ion therapy; Monte Carlo; electromagnetic process; nuclear interaction

【收稿日期】2024-04-19

【基金项目】国家自然科学基金(12275372);国家重点研发计划(2017YFC0107504);安徽省重点研究与开发计划(2023s07020020);中国科学技术大学双一流医学物理与生物医学工程交叉学科平台(YD2140000601);中国科学技术大学新医学创新团队项目(YD2140002002)

【作者简介】吴晋, 硕士研究生, 研究方向:碳离子放疗剂量的蒙特卡罗计算方法, E-mail: wujin1111@mail.ustc.edu.cn

前言

放射治疗在癌症治疗中发挥着至关重要的作用,超半数的恶性肿瘤患者需要接受放疗^[1]。碳离子束具有特殊的深度剂量分布特点,其剂量主要沉积在射程末端的布拉格峰区域。通过调节碳离子束能量,其布拉格峰可以精确落在肿瘤靶区,因而碳离子放疗可有效控制肿瘤^[2]。与传统的光子放疗相比,碳离子放疗在物理剂量分布和生物学效应上展现出优越性,特别适用于不宜手术或对常规射线不敏感的肿瘤治疗^[3-4]。中国科学院近代物理研究所自20世纪80年代已建设了大型重离子加速器,并在此基础上开展广泛的应用研究,其中包括利用碳离子束治疗不同深度的肿瘤前期临床研究,以及成功研发具有自主知识产权的国产医用碳离子治疗系统,这标志着我国在大型高端医疗设备研发领域取得重大突破^[5]。

放射治疗计划系统作为关键的软件基础设施,为临床医生和医学物理师提供定制放射治疗方案的计算支持。在碳离子治疗领域,这些系统不仅需要与专用治疗硬件兼容,还需要具有执行高保真度剂量计算算法的能力,准确模拟碳离子在人体生物介质中的复杂相互作用。目前的碳离子治疗计划中多采用解析算法,虽然其计算速度快,但由于碳离子的核反应复杂,解析算法无法充分考虑次级粒子引起的低剂量区贡献,且在不同组织交界处,解析算法计算误差大^[5]。蒙特卡罗模拟被普遍认为是剂量预测的金标准,但在碳离子放射治疗中应用 Geant4、TOPAS、GATE 等通用蒙特卡罗软件受到计算效率低下的显著影响,这主要归因于需要模拟的粒子数量庞大和涉及的底层物理现象复杂。为了提高计算速度和准确性,同时能够依照要求对束流源进行建模,本研究开发了名为 SPEEDO (SimPlifiEd codE for DOsimetry of carbon ions) 的快速蒙特卡罗程序。本研究主要包括以下两个任务:碳离子物理模型的研究;程序的开发和验证。这一创新方法有望成为现有碳离子治疗计划平台的宝贵计算补充,为剂量计算方法提供新的范式。

1 材料与方法

在患者的治疗计划和优化过程中使用 CT 数据来建立患者模型,通过 CT 重建技术将患者的影像数据转换成质量密度的三维网格,因此碳离子和次级粒子的输运需要在体素化的几何体中进行模拟^[6-7]。

1.1 需要模拟和分析的物理过程

SPEEDO 能在体素化几何体中模拟 450 MeV/u

以下能量的碳离子及其次级带电粒子的输运,通过质量密度和元素组成来定义每一个体素。输运的物理过程包括碳离子与原子核和核外电子的弹性库伦碰撞、非弹性库伦碰撞和核反应。SPEEDO 中的带电粒子输运遵循使用连续慢化近似(CSDA)的标准 II 类浓缩历史格式^[8]。碳离子的 CSDA 射程被视为能量的函数,被制成表格,以用于估计其剩余射程。

1.1.1 步长采样 碳离子的输运模拟起始于步长 δ_x 的采样,即发生一次硬相互作用事件前移动的距离或到达步长限制值时移动的距离。在 SPEEDO 中,发生电离的库伦相互作用(δ 电子的生成)和核相互作用被考虑为硬事件,由于反应截面的能量依赖性,连续能量损失对步长施加了限制。因此, δ_x 由电离和核相互作用的总截面和步长限制共同决定,选取总截面对应的平均自由程和步长限制值中的最小值作为 δ_x 。

Geant4 是一款用于模拟粒子和物质间相互作用的开源软件包,本文的工作会使用 Geant4 来获取核相互作用的截面等相关数据^[9]。电离过程的截面可以通过计算,根据能量守恒,转移给自由电子的最大动能 T_e^{\max} 为:

$$T_e^{\max} = \frac{2m_e\beta^2\gamma^2}{1 + 2\gamma m_e/m_c + (m_e/m_c)^2} \quad (1)$$

其中, m_e 和 m_c 分别是以能量为单位的电子和碳离子的静止质量, β 是碳离子的相对论速度,相对论参数 γ 通过 $\gamma = E_c/m_c$ 计算得到,此处碳离子的总能量 $E_c = T_c + m_c$ 。

当 δ 电子的动能 $T_e > T_e^{\min}$,产生 δ 电子的微分截面可以被计算通过^[10]:

$$\frac{d\Sigma}{dT_e} = 2\pi r_e^2 m_e \frac{n_e}{\beta^2} \frac{1}{T_e^2} \left[1 - \beta^2 \frac{T_e}{T_e^{\max}} + \frac{T_e^2}{2E_c^2} \right] \quad (2)$$

其中, n_e 为材料的电子密度, r_e 为经典电子半径,当 $T_e^{\max} < T_e^{\min}$ 时此截面为 0,使用上式可以计算电离过程的总截面:

$$\Sigma(n_e, E_c, T_e^{\min}) = \int_{T_e^{\min}}^{T_e^{\max}} dT_e \frac{d\Sigma}{dT_e} \quad (3)$$

对于步长限制的设置,考虑每步反应的能量损失达到初始能量的 25% 时对应的最大步长为步长限制的值,即 0.25 为设定的阈值。移动一步后若粒子没有到达体素边界且步长小于步长限制值,则通过采样确定是否产生 δ 电子,或发生核相互作用,或者仅发生连续能量损失。

1.1.2 电磁过程 SPEEDO 中的电磁过程通过标准的 II 类浓缩历史模拟方案进行建模,并采用连续慢化近似^[8]。使用 Geant4 建立预先计算好的各材料的阻止

本领表,通过碳离子在材料中的步长来计算它的平均能量损失。对于一个在材料*i*中输运的动能为*E*的碳离子,当它按照上一节的步骤采样出步长 δx ,它在材料中的平均能量损失可通过公式计算^[11]:

$$\overline{\Delta E} = \frac{dE}{dx} \delta x \quad (4)$$

若此时能量损失 $\Delta T > \zeta E$,此处 ζ 为线性能量损失限制参数,设置为0.01。则视为发生大百分比的能量损失,此时能量损失被再次计算通过:

$$\overline{\Delta E} = E - f_r(r - \delta x) \quad (5)$$

其中,*r*为能量*E*的粒子对应的射程,*f_r*为通过剩余射程在CSDA表中反向查找能量的函数。

实际的能量损失是一个随机量,这个过程被称为能量歧离,被描述成离散函数的分布。能量歧离被建模成围绕在平均能量损失周围的随机波动,波动遵循具有玻尔方差的高斯分布^[12]:

$$\Omega^2 = 2\pi r_e^2 m_e c^2 N_{el} \frac{Z_h^2}{\beta^2} T_e S \left(1 - \frac{\beta^2}{2}\right) \quad (6)$$

其中,*T_e*为 δ 电子的截止能量,*N_{el}*为介质的电子密度,*Z_h*是入射粒子的电荷量, β 为入射粒子的相对论速度。

碳离子在介质中输运时除了能量损失,还伴随着由于许多小角度散射导致的偏转,模拟每次散射的碰撞过程会增加许多计算量。根据中心极限定理,多次库伦散射的净效应可以被建模为均值为0,标准差由Lynch等^[13-14]给出的公式计算:

$$\theta_0 = \frac{E_s}{\beta c p} \delta x \sqrt{\delta x / X_0} \left[1 + 0.038 \ln(\delta x / X_0)\right] \quad (7)$$

其中,*p*为碳离子的动量,*X₀*为材料的辐射长度,参数*E_s*一般情况下被认为是13.6 MeV的常量。

在SPEEDO中,本研究设置 δ 电子的截止能量*T_e^{min}*为0.1 MeV,只有当*T_e* > *T_e^{min}*时,才会模拟 δ 电子的生成, δ 电子的动能通过一种标准的拒绝采样方法来生成^[9]。转移给自由电子的最大动能随入射粒子能量的增加而增加,SPEEDO能模拟450 MeV/u以下的碳离子,产生 δ 电子的最大能量约为1.0 MeV,对应在水中的射程约为4.0~5.0 mm,电子进入模体后很快建立电子平衡。因此,当前版本的SPEEDO默认生成的 δ 电子能量当地沉积。

1.1.3 核相互作用 人体由60多种元素组成,其中超过90%的重量是由氢、碳、氮、氧和钙5种元素构成^[15],因此在SPEEDO中只考虑5类核相互作用,分别是碳-氢、碳-碳、碳-氧、碳-氮和碳-钙非弹性碰撞,SPEEDO不考虑碳离子和介质的弹性相互作用。利用从Geant4中提取的核相互作用截面数据来采样相

互作用类型。

通过采样确定发生某种核相互作用后,再通过采样产生次级粒子。在Geant4中利用多种强子模型来模拟核碰撞,这些模型详细地描述了物理过程,并且与实验结果有很好的 consistency^[16]。模拟这些模型涉及复杂的计算,非常耗时。为了在不牺牲精度的情况下加速模拟,使用预先计算的数据表来实现SPEEDO中的次级粒子采样。为了准备这些数据,在Geant4中修改反应过程,使其只发生核反应,分别模拟上述5种核相互作用。每种核反应对应碳离子的能量为10~450 MeV/u,间隔为10 MeV/u。

对于每种类型的次级粒子,在经过大数量核反应的蒙特卡罗模拟后,本研究对Geant4的结果进行统计分析,以获得这种粒子类型在每次核相互作用事件后的产额,以及其能量和散射角的概率密度分布。这些数据被制成表格存储在SPEEDO数据库中。当具有一定动能的初级碳离子与核子发生碰撞时,通过对产额数据表的插值来确定所有次级粒子类型的对应产额,对于每种次级粒子类型,相应地生成给定数量的粒子。例如,如果 α 粒子的产额是1.3,1个 α 粒子将会被产生,同时有30%的几率产生另一个 α 粒子;如果质子的产额是3.2,则会有3个质子同时被产生,并有20%的几率生成第4个质子;如果¹¹C的产额是0.1,则有10%的几率生成1个¹¹C,反之不生成¹¹C。次级粒子的能量和方向从表中的概率密度分布采样得到。对于某一次核相互作用的事件,这种采样方法并不满足碰撞前后的动量和能量守恒。但是经过足够多的核相互作用事件的采样后,总体结果在统计学意义上满足能量守恒定律。

在SPEEDO中选取的5种核相互作用理论上会产生上百种次级粒子,在统计Geant4输出的次级粒子信息的过程中,发现有十几种次级类型的数量之和占次级粒子总数的98%以上,次级粒子的数量分布信息如表1所示。SPEEDO将数量小于2%的剩余粒子统一归为其它粒子。当其他粒子被采样生成后,会就地沉积,由于其产率很低,因此对总剂量的影响可以忽略。本研究也忽略了核相互作用中产生的所有电中性粒子,主要包括次级中子和光子^[1]。对于一个200 MeV/u的碳离子束,入射进一个厚的水箱中,每个初级碳离子平均产生0.54个中子^[17]。按照这个数字,假设一个中等尺寸的靶体积为125 cm³,碳离子治疗产生的中子剂量约为每1 Gy治疗剂量中有8 mGy的中子剂量,即不到治疗剂量的1%^[18]。这比次级粒子产生的剂量还要小10倍,因此考虑对电中性粒子的忽略是可接受的。

表 1 通过 Geant4 模拟 250 MeV/u 碳离子与不同靶核发生核反应统计得到的每种次级粒子同位素的产率

Table 1 The yield of each secondary particle isotope was calculated by simulating the nuclear reaction of 250 MeV/u carbon ions with different target nuclei using Geant4

次级粒子	产额占比			
	C-H	C-C	C-O	C-Ca
n	0.220	0.326	0.311	0.316
¹ H	0.377	0.325	0.316	0.339
² H	0.042	0.043	0.042	0.061
³ H	0.009	0.013	0.013	0.018
³ He	0.013	0.012	0.012	0.016
⁴ He	0.161	0.135	0.114	0.066
⁶ He	0	3.0×10 ⁻⁴	4.0×10 ⁻⁴	4.0×10 ⁻⁴
⁷ He	4.0×10 ⁻⁵	3.0×10 ⁻⁴	9.0×10 ⁻⁵	4.0×10 ⁻⁵
⁴ Li	0.001	0.004	0.004	0.003
⁶ Li	0.013	0.009	0.008	0.005
⁷ Li	0.004	0.004	0.004	0.002
⁸ Li	1.0×10 ⁻⁴	0.001	4.0×10 ⁻⁴	2.0×10 ⁻⁴
⁹ Li	4.0×10 ⁻⁵	1.0×10 ⁻⁴	3.0×10 ⁻⁵	1.0×10 ⁻⁵
⁶ Be	0.001	3.0×10 ⁻⁴	2.0×10 ⁻⁴	3.0×10 ⁻⁵
⁷ Be	0.006	0.004	0.003	0.002
⁸ Be	0.012	0.009	0.007	0.002
⁹ Be	0.002	0.002	0.001	0.001
¹⁰ Be	0.001	0.002	0.001	2.0×10 ⁻⁴
¹¹ Be	0	5.0×10 ⁻⁵	2.0×10 ⁻⁵	5.0×10 ⁻⁶
⁸ B	2.0×10 ⁻⁴	4.0×10 ⁻⁴	1.0×10 ⁻⁴	1.0×10 ⁻⁴
⁹ B	0.003	0.002	0.001	4.0×10 ⁻⁴
¹⁰ B	0.014	0.008	0.007	0.003
¹¹ B	0.015	0.014	0.010	0.004
⁹ C	4.0×10 ⁻⁵	1.0×10 ⁻⁴	2.0×10 ⁻⁵	5.0×10 ⁻⁶
¹⁰ C	0.003	0.002	0.001	3.0×10 ⁻⁴
¹¹ C	0.022	0.014	0.009	0.004
¹² C	0.003	0.002	0.007	0.002
π介子	4.0×10 ⁻⁵	3.0×10 ⁻⁵	4.0×10 ⁻⁵	0.010
γ	0.076	0.061	0.083	0.098
其它粒子	0.001	0.005	0.045	0.048

次级带电粒子的输运方式与初级碳离子相似,包括能量歧离、多重库伦散射和电离过程。尽管本研究对核反应模型进行了简化,但对每一种次级粒子统计核相互作用的次级粒子产额、能量和散射角是不现实的。因此研究暂且忽略这些次级粒子的核相互作用,在研究的对比结果中,ciFMC和TOPAS剂量计算结果有很好的一致性,表明这种简化是可接受的。

1.2 程序的开发和验证

1.2.1 基于 OpenMP (Open Multi-Processing) 的并行计算 SPEEDO是在OpenMP框架下用C++语言编写的程序,具备并行计算的功能以用来和多线程模式的TOPAS软件对比剂量结果^[19-20]。OpenMP是一种并行编程的规范,用于C/C++和Fortran语言,通过一系列编译器指令、库函数和环境变量,简化多线程并行编程。SPEEDO的程序结构如图1所示。程序主要包含初始化随机数种子,导入相空间源文件和在OpenMP指令下并行完成粒子的输运等过程。

1.2.2 程序的对比测试 本研究在多种材料模体中进行剂量计算研究以验证SPEEDO物理模型的准确性,着重关注物理剂量计算的结果和通用蒙特卡罗软件结果的对比情况,分别使用4种均质模体,即液态水、肺、软组织和骨头,材料组成信息获取自Geant4官方公开的材料数据。然后将SPEEDO计算的剂量与蒙特卡罗软件TOPAS 3.8计算的剂量进行比较。TOPAS是基于Geant4多方联合开发的一款专门用于放射治疗物理的蒙特卡罗模拟软件,继承Geant4的物理模型,并进行针对放疗领域的优化。在TOPAS中使用与SPEEDO相同的物理设置来获得物理数据。在所有的模体事件里,模体尺寸为10 cm×10 cm×40 cm(x×y×z),一个体素的大小为0.1 cm×0.1 cm×0.1 cm。在这些情况下,研究指定初始能量的单能单向的宽光束(一个4 cm×4 cm的方形野)。本研究与中科院近代物理研究所生物医学中心合作,通过模拟测量武威重离子治疗中心医用重离子加速器示范装置(HIMM-WW)上的水箱剂量的场景,对比程序的剂量结果和实验测量值的吻合程度。为了测试简化核相互作用后SPEEDO的计算效率,本研究通过OpenMP设置并行计算的线程数为12,同时也将TOPAS中的线程数设置为12,考虑比较两者使用相同线程数花费的时间。SPEEDO使用的计算设备为Intel® Core™ i7-8700K CPU处理器。TOPAS使用的计算设备为Intel(R) Xeon(R) E5-4607 CPU处理器。

2 结果

2.1 SPEEDO中物理模型的搭建

经过第1.1小节中对碳离子输运物理模型的讨论研究,依照描述的方法对物理模型完成搭建。通过与TOPAS中设置的接近真实情况的物理模块进行对比,如表2所示。TOPAS中G4EMStandardPhysics_option4和HadronPhysicsQGSP_BIC_HP对应SPEEDO的Electromagnetic Processes和Inelastic Interaction。TOPAS中的G4IonBinaryCascadePhysics、G4HadronElasticPhysicsHP、G4StoppingPhysics和G4decay用来描述次级带电粒子的低能、弹性散射和衰变过程。这些过程在SPEEDO中进行合理简化。

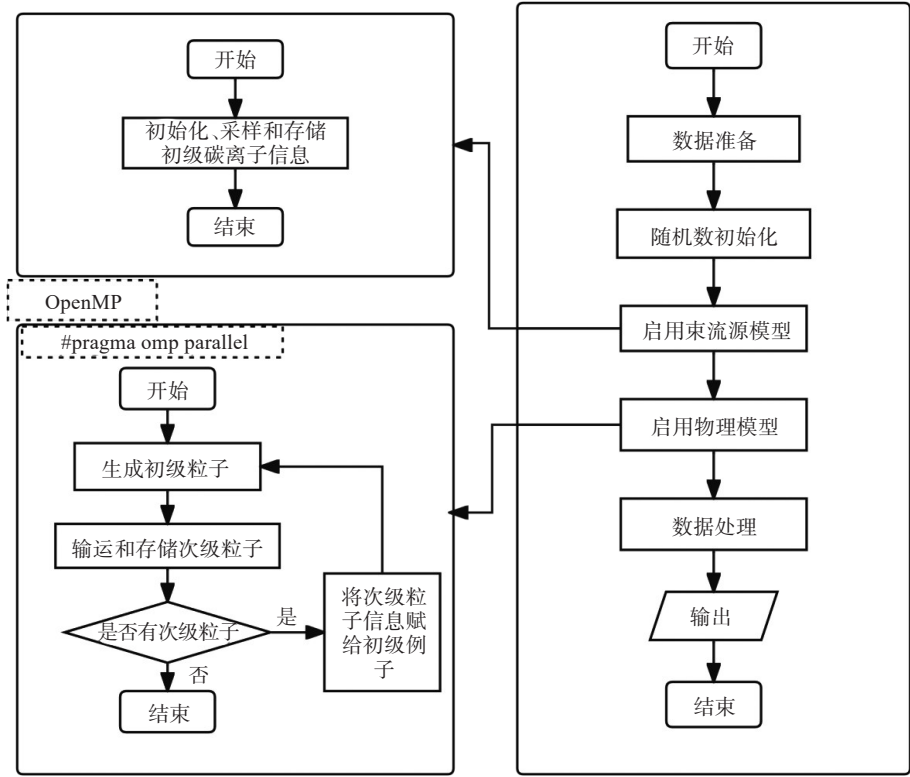


图1 SPEEDO 程序流程图
Figure 1 SPEEDO program flowchart

表 2 SPEEDO 和 TOPAS 物理模型 的设置对比
Table 2 Comparison of SPEEDO and TOPAS physical model settings

名称	TOPAS	SPEEDO
物理模块	G4EMStandardPhysics_option4	Electromagnetic Processes (CSDA,
	HadronPhysicsQGSP_BIC_HP	Ionisation, MultipleScattering)
	G4IonBinaryCascadePhysics	Inelastic Interaction
	G4HadronElasticPhysicsHP	Nuclear Interaction
	G4StoppingPhysics	
	G4decay	

2.2 SPEEDO 和 TOPAS 剂量分布的对比和分析

2.2.1 对比 不同能量下的剂量分布如图 2~图 6 所示。在所有情况下,SPEEDO和TOPAS均模拟了1×10⁷个初级碳离子。本研究的模拟精度是通过相对不确定度σ/D来量化的。在每一个体素内,σ是由所有剂量计数器的剂量结果估计的不确定度,D是计算得到的剂量值。剂量大于最大剂量的10%的体素区域的平均相对不确定度σ̄/D小于1%。

本文首先模拟宽光束(一个4 cm×4 cm 均匀照射的方形野)在均质水模中的剂量分布,图2展示了在水模中的积分剂量深度曲线,图3展示了从入射区域(z=50 mm)、布拉格峰正前方(z=125 mm)和布拉格峰后(z=170 mm)的250 MeV/u 光束情况下获得的3

个横向剂量分布。图 4~图 6 展示了其他均质模体的剂量分布结果,在大多数情况下,SPEEDO 和 TOPAS 的剂量结果有着良好的一致性。

2.2.2 数据分析 本研究计算了所有模拟情况下剂量大于最大剂量点 10%剂量的体素区域,SPEEDO 和 TOPAS 之间的体素级剂量差异,如表 3 所示。使用相对最大剂量平均误差ε_{D10%}来评价这种差异^[21],计算公式为:

$$\bar{\epsilon}_{D10\%} = \frac{|D_{SPEEDO} - D_{TOPAS}|}{D_{max}} \tag{8}$$

其中,|D_{SPEEDO} - D_{TOPAS}|表示每个满足要求的体素做差之后的标准矢量范数,对于大部分模拟情况下,ε_{D10%}小于2%。而250 MeV/u 的宽束在肺模体中的

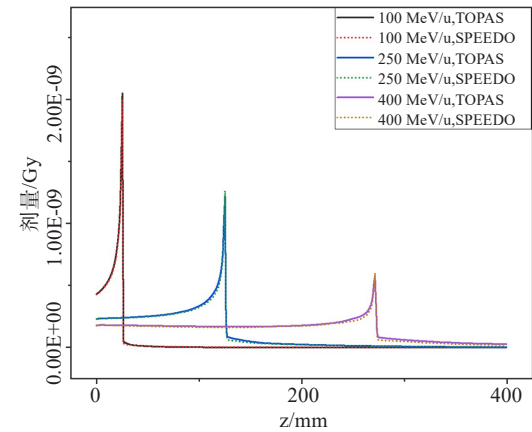


图2 宽束在水模中的积分剂量深度曲线

Figure 2 Integrated dose depth curve of wide beam in water phantom

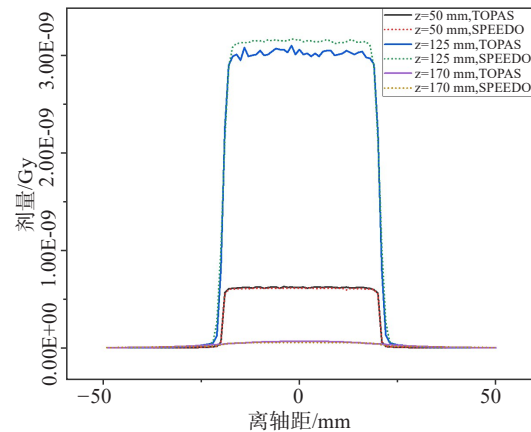
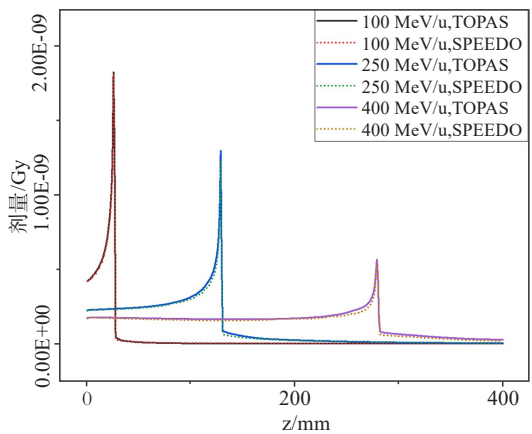
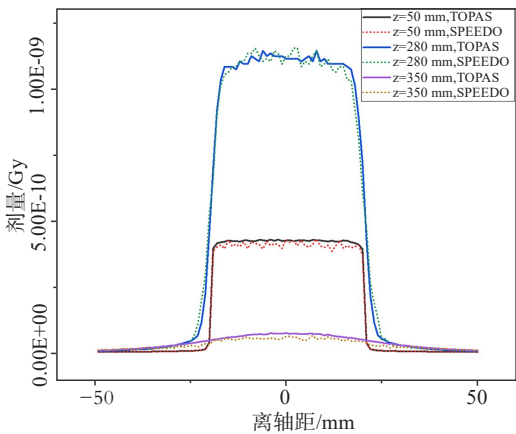


图3 250 MeV/u的碳离子束在水模中的横向剂量分布曲线

Figure 3 Lateral dose distribution curve of 250 MeV/u carbon ion beam in a water phantom



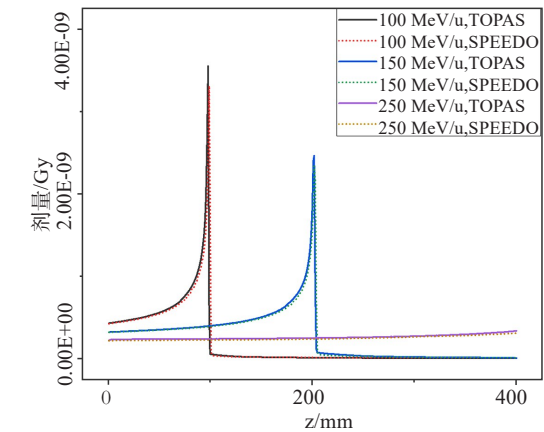
a: 宽束在软组织模体中的剂量深度曲线



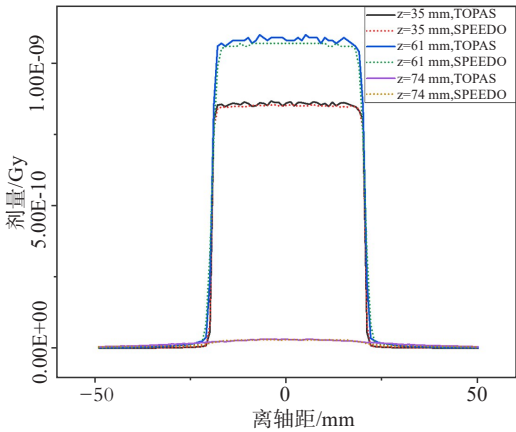
b: 400 MeV/u的宽束在软组织模体入口处、靠近布拉格峰处和超过布拉格峰处的横向剂量分布

图4 软组织模体中的剂量分布

Figure 4 Dose distribution in soft tissue phantom



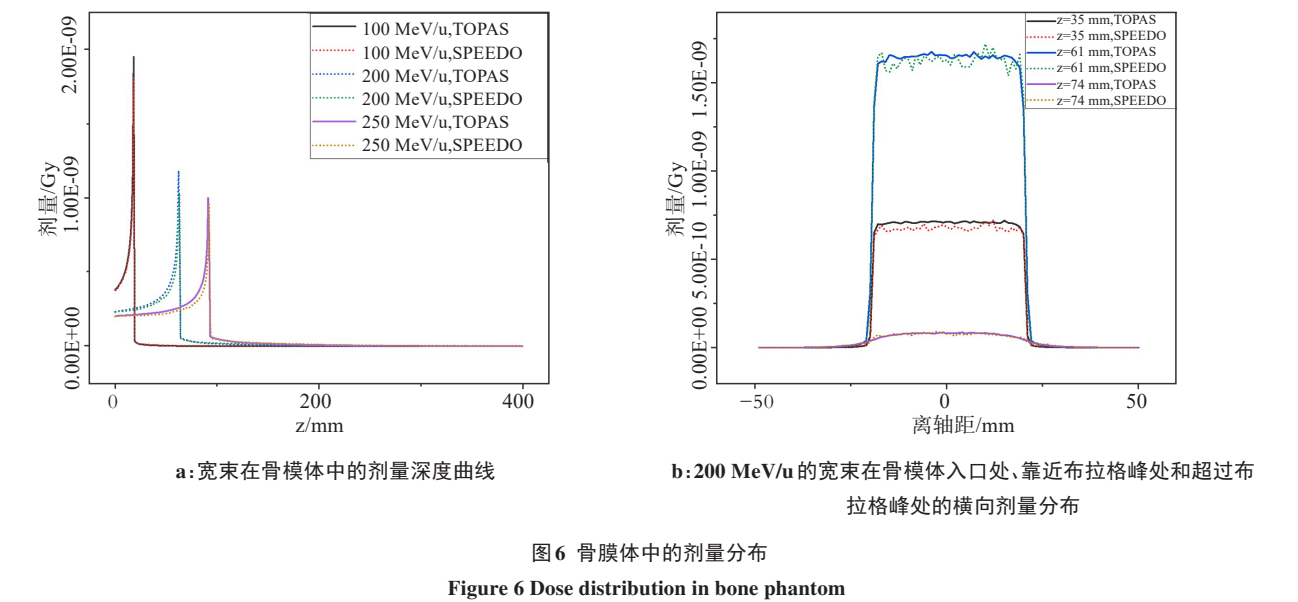
a: 宽束在肺模体中的剂量深度曲线



b: 150 MeV/u的宽束在肺模体入口处、靠近布拉格峰处和超过布拉格峰处的横向剂量分布

图5 肺模体中的剂量分布

Figure 5 Dose distribution in lung phantom



$\bar{\varepsilon}_{D10\%}$ 达到 5.24%,这是由于 250 MeV/u 的理论碳离子束布拉格峰位置和射程超过材料箱的尺寸,故 $\bar{\varepsilon}_{D10\%}$ 的结果不具有参考意义。随着入射能量的增加,不同材料中的 $\bar{\varepsilon}_{D10\%}$ 也相应增高,这可以归因于随着碳离子能量的增加,其发生核反应的概率变大,而 SPEEDO 对于核反应模型进行简化,因此高能情况下剂量误差会增加。

表3 所有模拟情况对应的相对最大剂量平均误差 $\bar{\varepsilon}_{D10\%}$

Table 3 Average error ($\bar{\varepsilon}_{D10\%}$) of the relative maximum dose for all simulated cases

材料	能量/MeV·u ⁻¹	$\bar{\varepsilon}_{D10\%}/\%$	材料	能量/MeV·u ⁻¹	$\bar{\varepsilon}_{D10\%}/\%$
水	100	0.64	肺	100	1.49
	250	0.76		150	0.78
	400	1.50		250	5.24
软组织	100	0.71	骨头	100	0.55
	250	0.75		200	1.12
	400	1.43		250	1.50

2.2.3 计算效率的分析 本研究通过建立简化的碳离子核反应模型,进一步提高碳离子蒙特卡罗模拟的计算效率,因此使用相同的 CPU 线程数对 TOPAS 和 SPEEDO 进行相同事件的模拟时间比较。TOPAS 使用 Geant4 内置的强子模型模拟所有粒子的核相互作用,SPEEDO 使用自建的简化核反应模型,分别模拟 1×10^6 个碳离子,场景设置为 $4\text{ cm}\times4\text{ cm}$ 均匀分布的宽束垂直照射体素大小 $0.1\text{ cm}\times0.1\text{ cm}\times0.1\text{ cm}$ 的水箱, E_{cut}

设置为 1 mm,均在 CPU 上使用 12 个线程。TOPAS 计算使用的是 Intel(R) Xeon(R) E5-4607,SPEEDO 计算使用的是 Intel(R) Core(TM) i7-8700K,计算时间如表 4 所示。从结果可以看出,在入射碳离子能量较低时,二者用时基本持平。当能量增高后,SPEEDO 的计算用时小于 TOPAS。随着能量的增加,SPEEDO 模拟用时与 TOPAS 用时之比逐渐降低。

表4 SPEEDO 和 TOPAS 模拟时间

Table 4 SPEEDO and TOPAS simulation time

能量/MeV·u ⁻¹	SPEEDO 模拟时间	TOPAS 模拟时间	SPEEDO 与 TOPAS 用时之比
100	95.0 s	114.2 s	0.83
250	7.2 min	28.0 min	0.26
400	13.8 min	105.0 min	0.13

2.3 SPEEDO 和实验测量值的对比和分析

本研究对甘肃省武威肿瘤医院重离子中心医用重离子加速器装置(HIMM-WW)的治疗头束流进行建模,并与在 HIMM-WW 的 1 号治疗室的测量值进行对比。图 7~图 8 为 HIMM-WW 的 1 号治疗室在水箱等中心点处使用免洗胶片测得的横向剂量分布与 ciFMC 模拟相同条件下的横向剂量分布对比。经验证,在 SPEEDO 中建立的点扫描机头能够较好地模拟 HIWW-MM 产生的束流线。

图 9~图 11 为使用电离室在 HIMM-WW 的 2 号治疗室的水箱中测量的深度积分剂量分布曲线(IDD)与 SPEEDO 模拟相同条件下的结果对比以及相对误差。

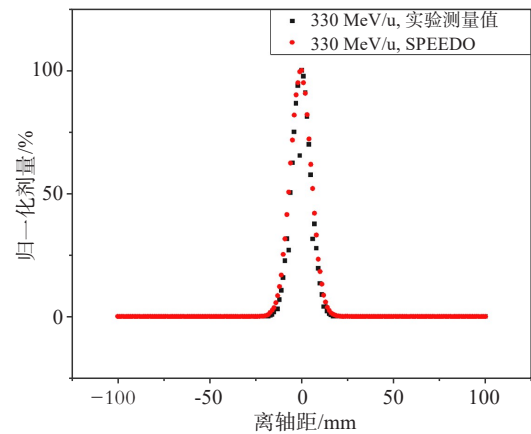


图 7 330 MeV/u 的碳离子笔形束在水箱等中心点的横向剂量分布
Figure 7 Lateral dose distribution of 330 MeV/u carbon ion pencil beam in water phantom isocenter

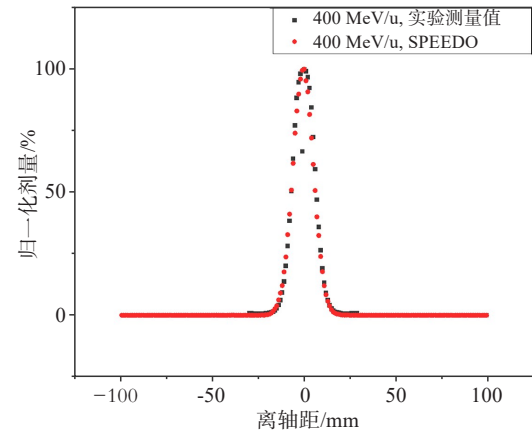
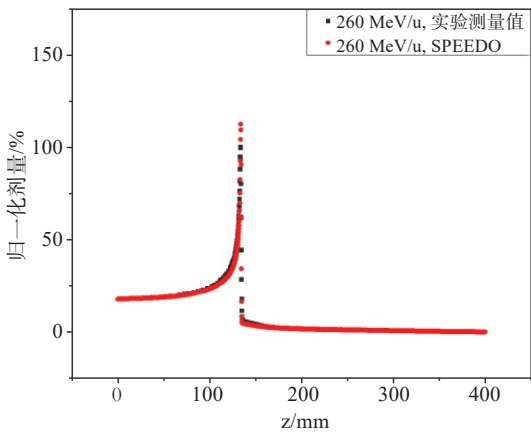
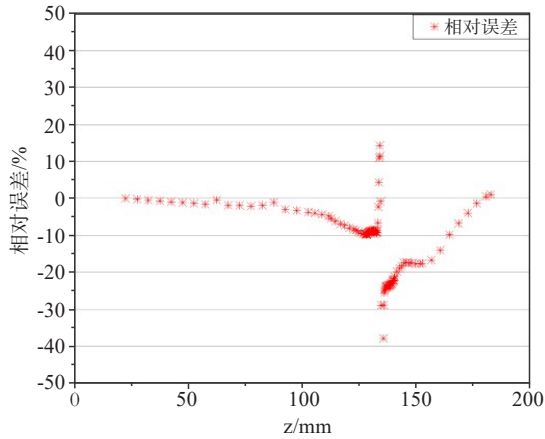


图 8 400 MeV/u 的碳离子笔形束在水箱等中心点的横向剂量分布
Figure 8 Lateral dose distribution of 400 MeV/u carbon ion pencil beam in water phantom isocenter

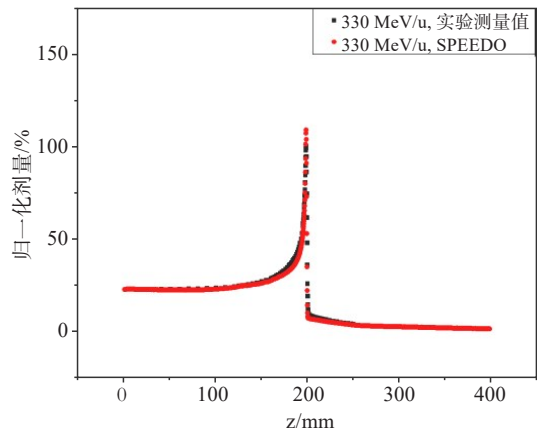


a:260 MeV/u 碳离子笔形束在水箱中的积分剂量深度曲线

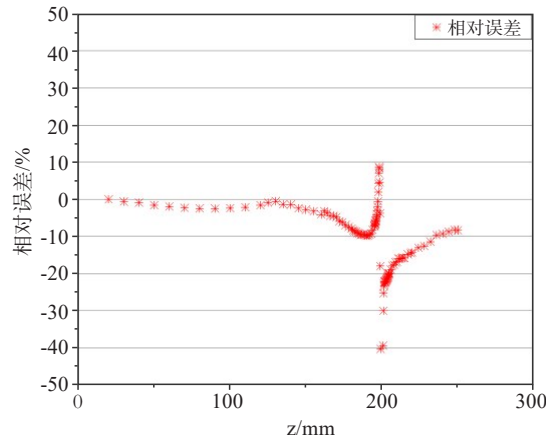


b:SPEEDO 的模拟结果和测量值的相对误差

图 9 260 MeV/u 碳离子笔形束剂量对比
Figure 9 Dose comparison of 260 MeV/u carbon ion pencil beam



a:330 MeV/u 碳离子笔形束在水箱中的积分剂量深度曲线



b:SPEEDO 的模拟结果和测量值的相对误差

图 10 330 MeV/u 碳离子笔形束剂量对比
Figure 10 Dose comparison of 330 MeV/u carbon ion pencil beam

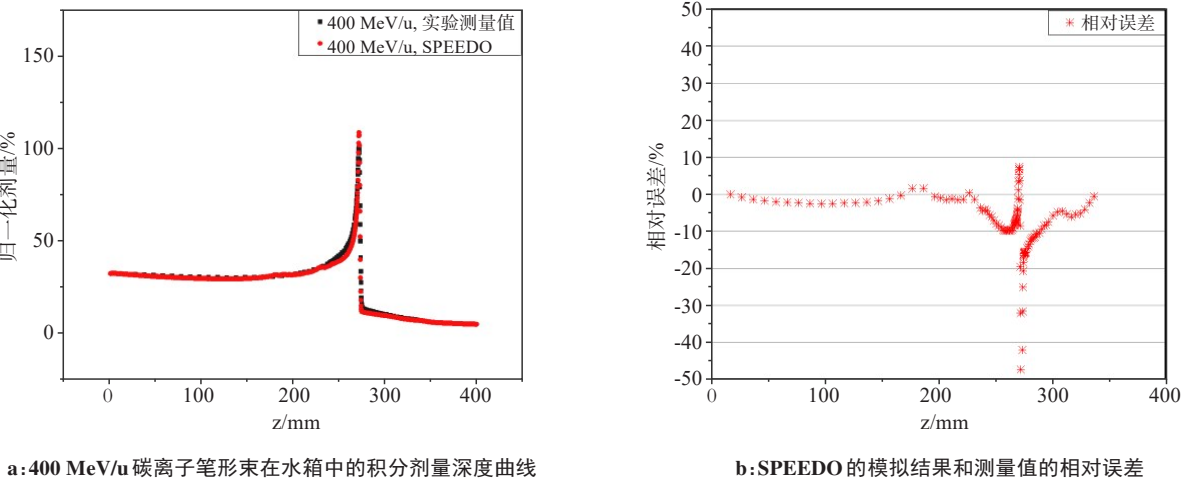


图 11 400 MeV/u 碳离子笔形束剂量对比
Figure 11 Dose comparison of 400 MeV/u carbon ion pencil beam

本研究获取的IDD测量数据为归一化数据,在作图时考虑在入射位置处对测量值和模拟值进行归一化。由于测量死区的影响,根据TOPAS的模拟结果对测量位置进行标定。通常情况下,测量数据很难将布拉格峰区测准,这是由于测量探测器在水中移动的最小距离造成的。因此在入射位置归一化可以得到更为准确的比较结果。由剂量对比图的结果可以观察到测量值和模拟值的良好一致性,但观察每个能量下的相对误差点图可知在布拉格峰区前后的误差偏大,原因如下:(1)本研究提出的核相互作用简化所引入的系统误差;(2)测量探测器难以测准锋锐的布拉格峰。

3 讨论和结论

本研究成功开发了基于简化核反应模型的碳离子快速蒙特卡罗剂量计算程序SPEEDO,成功对武威重离子治疗中心医用重离子加速器点扫描模式进行建模,并与实验测量值取得良好的一致性。虽然研究主要针对具有单一初始能量和方向的碳离子源,SPEEDO也具备模拟有多种初始条件粒子的能力。下一步的工作将重点放在替换均质材料箱为患者实际体模,进而计算患者体内的剂量分布,同时也会考虑 γ 通过率计算。然而,仍存在一些亟待解决的挑战:(1)源信息的精确度:为了满足临床应用的准确性要求,本研究需要为SPEEDO提供更准确的碳离子源信息,其中包括碳离子的解析束源建模;(2)电子输运模拟:在SPEEDO中,假设产生的次级电子会即刻沉积,尽管在多数场景中,这一假设都是准确和可接受的,但在特定情境(如肺部或两种密度差异大的组织交界处)下,电子的精确输运模拟变得尤为关

键;(3)性能优化:当前的SPEEDO虽然经过CPU并行优化,但在某些情况下仍无法满足临床的实时计算需求,研究团队正在利用GPU加速技术,将SPEEDO的代码进一步优化,提供更快速的计算性能。

综上所述,SPEEDO已经展现其在碳离子治疗剂量计算领域的巨大潜力,但为了更好地适应临床的具体需求,仍需在上述领域进行更多的研究与优化。

【参考文献】

[1] Schardt D, Elsässer T, Schulz-Ertner D. Heavy-ion tumor therapy: physical and radiobiological benefits[J]. Rev Mod Phys, 2010, 82(1): 383-425.

[2] 刘锐锋,张秋宁,田金徽,等. 重离子治疗在肿瘤治疗中的临床应用及前景展望[J]. 中国肿瘤, 2021, 30(8): 619-626.
Liu RF, Zhang QN, Tian JH, et al. Application and prospect of heavy ion therapy in cancer treatment[J]. China Cancer, 2021, 30(8): 619-626.

[3] Amaldi U, Kraft G. Radiotherapy with beams of carbon ions[J]. Rep Prog Phys, 2005, 68(8): 1861-1882.

[4] 叶飞,李强. 重离子治癌相关研究[J]. 原子核物理评论, 2010, 27(3): 309-316.
Ye F, Li Q. Researches related to heavy ion cancer therapy[J]. Nuclear Physics Review, 2010, 27(3): 309-316.

[5] 肖国青,李强,张小奇,等. 碳离子治疗系统的研发与成果转化[J]. 科技促进发展, 2020, 16(1): 9-17.
Xiao GQ, Li Q, Zhang XQ, et al. The development and commercialization of carbon ion cancer therapy facility[J]. Science & Technology for Development, 2020, 16(1): 9-17.

[6] Kawrakow I, Fippel M, Friedrich K. 3D electron dose calculation using a Voxel based Monte Carlo algorithm (VMC)[J]. Med Phys, 1996, 23(4): 445-457.

[7] Fippel M. Fast Monte Carlo dose calculation for photon beams based on the VMC electron algorithm[J]. Med Phys, 1999, 26(8): 1466-1475.

[8] Berger MJ. Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles[J]. Methods in Computational Physics, 1963, 1: 135-215.

[9] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et al. Geant4—a simulation toolkit[J]. Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A, 2003, 506(3): 250-303.

[10] Group PD. Review of particle physics[J]. Chinese Phys C, 2014(9): 1-4.

- [11] Kawrakow I. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version[J]. Med Phys, 2000, 27(3): 485-498.
- [12] Bohr N. The penetration of atomic particles through matter[J]. Freshw Biol, 1948, 18: 1-114.
- [13] Lynch GR, Dahl OI. Approximations to multiple coulomb scattering [J]. Nucl Instrum Methods Phys Res Sect B, 1991, 58(1): 6-10.
- [14] Highland VL. Some practical remarks on multiple scattering[J]. Nucl Instrum Methods, 1975, 129(2): 497-499.
- [15] 张国明. 人体元素与周期表[J]. 黑龙江大学自然科学学报, 1986(4): 70-71.
Zhang GM. Human elements and periodic table[J]. Journal of Natural Science of Heilongjiang University, 1986(4): 70-71.
- [16] Wenzel H, Yarba J, Dotti A. The Geant4 physics validation repository [J]. J Phys Conf Ser, 2015, 664(6): 062066.
- [17] Gunzert-Marx K, Iwase H, Schardt D, et al. Secondary beam fragments produced by 200 MeV/u ^{12}C ions in water and their dose contributions in carbon ion radiotherapy[J]. New J Phys, 2008, 10(7): 075003.
- [18] Iwase H, Gunzert-Marx K, Haettner E, et al. Experimental and theoretical study of the neutron dose produced by carbon ion therapy beams[J]. Radiat Prot Dosimetry, 2007, 126(1/4): 615-618.
- [19] Sato M. OpenMP: parallel programming API for shared memory multiprocessors and on-chip multiprocessors[C]//15th International Symposium on System Synthesis. Piscataway, NJ, USA: IEEE, 2002: 109-111.
- [20] Doerner E, Caprile P. Technical note: parallel implementation of the EGSnrc Monte Carlo simulation of ionizing radiation transport using OpenMP[J]. Med Phys, 2017, 44(12): 6672-6677.
- [21] Qin N, Pinto M, Tian Z, et al. Initial development of goCMC: a GPU-oriented fast cross-platform Monte Carlo engine for carbon ion therapy [J]. Phys Med Biol, 2017, 62(9): 3682-3699.

(编辑:陈丽霞)