

放疗剂量测量中相空间数据格式的标准与转换

严华刚^{1,2}, 刘志翔¹, 曲典¹, 刘武²

1. 首都医科大学生物医学工程学院理学与生物医学工程实验教学中心, 北京 100069; 2. 美国耶鲁大学医学院放射治疗系, 美国纽黑文 06510

【摘要】相空间数据是放疗剂量测量的蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)模拟中某一截面或某些截面处各种射线的类型、位置坐标、方向和能量等信息。相空间数据的使用是这类MC模拟的重要辅助手段。本文旨在介绍放疗剂量测量的MC模拟中相空间数据的概念和通用的国际原子能机构(IAEA)格式标准,并提出一种基于常用MC工具软件Geant4、将excel格式相空间文件转换为IAEA标准格式(phsp格式)的方法,以解决使用IAEA相空间数据格式标准,尤其是使用Geant4的研究人员在采用excel格式相空间数据时遇到的问题。通过引入一个存储并推送相空间数据的类,可以成功实现excel格式相空间文件到IAEA标准格式的转换。

【关键词】放射治疗;剂量测量;蒙特卡洛模拟;相空间数据;IAEA标准;excel格式;格式转换

【中图分类号】R815

【文献标志码】A

【文章编号】1005-202X(2017)04-0335-05

Standard and conversion of the phase-space data format in dose measurement of radiotherapy

YAN Huagang^{1,2}, LIU Zhixiang¹, QU Dian¹, LIU Wu²

1. Laboratory of Science and Biomedical Engineering, School of Biomedical Engineering, Capital Medical University, Beijing 100069, China; 2. Department of Therapeutic Radiology, Yale Medical School, New Haven 06510, USA

Abstract: Phase-space data refer to the information of the type, position, direction, and energy of particles in a plane or several planes in the Monte Carlo (MC) simulations of the radiotherapy dose measurement. As an important assistant method, the use of phase-space data facilitates the MC simulations. The paper aims to introduce the concept of phase-space data in MC simulation and the International Atomic Energy Agency (IAEA) standard of phase-space data format, and to propose a method for converting phase-space data stored in excel files to the standard IAEA format (phsp format) using Geant4, a popular MC simulation toolkit, in order to solve the problem of using phase-space data in excel format for the researcher who used the phase-space data in IAEA standard format, especially the Geant4 users. By introducing a class that temporarily stores and forwards phase-space data to Geant4, the conversion of excel format to IAEA standard format can be implemented successfully.

Keywords: radiotherapy; dose measurement; Monte Carlo simulation; phase-space data; International Atomic Energy Agency standard; excel format; format conversion

前言

相空间数据是放疗剂量测量的蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)模拟中某一截面或某些截面处各种射线的类型、位置坐标和速度等信息,相当于射线在这些个平面上的“抓拍”。相空间数据的使用是这类MC模拟的重要辅助手段。目前不同MC软件输出的相空间数据格式各异,国际原子能机构(IAEA)在2006

年出台了相空间数据格式的一个标准。本文介绍该标准并用常用MC工具软件Geant4实现excel格式相空间文件到IAEA标准格式(phsp格式)的转换。

1 相空间数据简介

放疗剂量测量中的相空间数据于1995年由Lovellock^[1]推出直线加速器光子束的模块化MC方法时正式提出的。Lovellock的方法是将通过某一预设平面的粒子类型、位置坐标、方向、能量、统计权重等信息保存为相空间文件,作为下一阶段模拟的输入源。相空间文件还可以包含这些粒子所经历的不同相互作用信息,以便进行各种统计分析。在这个概念提出之前,研究人员为了研究放疗计划或进行剂量测量,必须根据

【收稿日期】2016-12-09

【基金项目】北京市教委青年拔尖人才项目(CIT&TCD201404182)

【作者简介】严华刚,博士,副教授,主要研究方向:医学物理,E-mail: yanhg@ccmu.edu.cn; 刘志翔,硕士,副教授,主要研究方向:医学物理,E-mail: ml_001163@sina.com。

【通信作者】刘武,E-mail: wu.liu@yale.edu

医用加速器厂家提供的一些参数模拟射线的产生过程,以得到准确的射线束信息。后来直线加速器厂家逐渐认识到这一点,开始提供其射线源的相空间文件^[2],为其客户和科研人员省却了射线源本身的模拟产生过程,方便进行相关的放疗剂量计算。除了放疗的剂量测量^[3-4],相空间数据还可用于辅助放射源的设计与射束验证^[5-8],包括用于放疗虚拟源的设计与射束验证^[9-10],以及多叶准直器(MLC)的设计^[11]。利用相空间数据,可以深入分析射束的能流、能谱、形状、角度分布以及各种物理量之间的关联。此外,相空间文件还可用于节省运算时间,提升放疗MC模拟的效率^[12-14]。图1为射线透射剂量的MC模拟中相空间数据的应用示例框图。

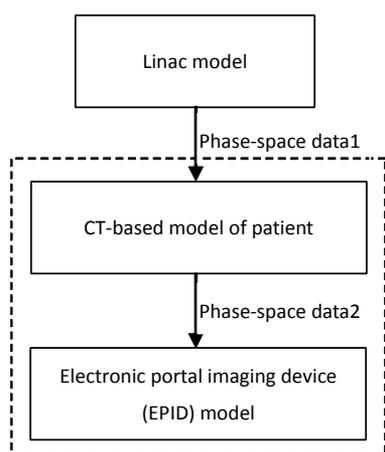


图1 相空间数据应用1例

Fig.1 An example applying phase-space data

2 IAEA 相空间数据格式

IAEA 相空间数据格式标准的提出与相空间数据的应用密不可分。医用加速器越来越广泛地应用于临床,放疗的质量保证(QA)要求进行大量的剂量测量工作。MC方法作为一种得到广泛认可的模拟运算工具,能考虑到直线加速器的各个组件,包括用于测量剂量的材料。研究人员相应地还开发了多种可辅助放疗计划的模拟程序,可准确模拟射线探测器的响应过程。模拟计算的准确性依赖于射线源的精确数据,包括从医用加速器中出来的所有初级和次级粒子的类型、能量、角度和位置信息,即相空间数据。如要生成这些数据,要求对加速器生产厂家的设计细节有深入了解。但要了解厂家的这种设计和技术细节几乎不可能(商业机密),而且要通过MC方法来产生相空间数据也需要复杂的编程和验证,因此对新放疗技术的研发自然造成一种壁垒。从另一个角度讲,医用加速器生产厂家数量并不多,加速器类型也有限,因此射线源的模拟重复性很高。IAEA 出台相空间数据标准的目的就在

于为医用加速器和相关放射源的射束建立一个公共数据库,免费给医学物理学专家、剂量研究人员和治疗计划系统厂商提供一个可面向不同应用的统一数据集,以避免重复进行MC模拟计算。IAEA 对于外照射的放射治疗源的相空间数据的生成和存储格式均有规定。可以定义的放射线类型不受限制,可以是光子、电子、质子、碳离子或中子等。

如前文所述,相空间数据定义为从放疗射线源出来的粒子集合,用这些粒子的物理特征代表所有从射线源出来的粒子的特征,包括能量、粒子类型、位置、方向、统计权重和历史。这个集合中每个粒子在相空间数据中只有1条记录。相空间数据可以是对真实放疗射线源的MC模拟的结果记录,即相空间文件,也可以是直接从一段模拟射线源的计算机程序的输出。为方便交流,IAEA 在2006年出台了一个将相空间数据格式标准化的报告^[15]。该报告规定,相空间数据包含一个描述数据或事件(event)发生器代码格式的头文件(header file,扩展名 .IAEAheader),包括所存信息的比特顺序;而相空间信息(即粒子的各种物理量)则记录在另一个数据文件(phsp file,扩展名 .IAEAphsp)中,或由事件发生器输出。表1罗列了所记录或输出的相空间信息。头文件是一个单独的ASCII码文件,包含的信息分为强制(mandatory)信息和可选信息,并可在必要的地方加上注释。它规定了在数据文件中存储的变量类型,或是否采用常量。例如,在某一z平面上采集的相空间数据就无需记录每个粒子的z坐标,只需在头文件中说明该平面的z坐标即可。以二进制方式记录的phsp数据文件内不含分隔符。有关IAEA相空间数据格式的详细情况可参考IAEA报告^[15]。该报告还规定了向IAEA提交相空间文件的程序。

3 Geant4 实现相空间文件从 excel 格式到 IAEA 标准格式的转换

3.1 Geant4 及其 IAEA 标准相空间数据的读写接口

Geant4 是一套用于模拟粒子透射物质的MC工具软件。与其它MC程序类似,它原本是在高能物理中用来模拟粒子与物质相互作用的一套程序,包含电磁作用、强子过程和光学过程在内的各种物理过程和模型,可以模拟各种射线和粒子在各种几何形状和物质组成的物体中的轨迹和能量沉积。由于其基于C++语言面向对象的程序架构和开放性,研究人员可以在Geant4中定制自己感兴趣的物体几何模型和物理模型,分析感兴趣的物理量。Geant4在医学中主要用于剂量的计算和分析。Geant4是由基于Fortran语言的Geant3发展而来,于1998年成型。由于C++编程相对于Fortran编

表1 相空间数据包含的粒子信息

Tab.1 Information of particles contained in the phase-space data

Variable	Meaning	Type of variable
x	x-coordinate in cm	Real \times 4
y	y-coordinate in cm	Real \times 4
z	z-coordinate in cm	Real \times 4
u	Direction cosine along x	Real \times 4
v	Direction cosine along y	Real \times 4
E	Kinetic energy in MeV	Real \times 4
Statistical weight	Particle statistical weight	Real \times 4
Particle type	Type of the particle	Integer \times 2
Sign_of_W	Sign of W (direction cosine in z)	Logical \times 1
Is_new_history	Signifies if particle belongs to new history	Logical \times 1
Integer_extra	Extra storage space for variables (e.g., EGS LATCH, incremental history number, etc.)	$n \times (\text{Integer} \times 4)$ ($n \geq 0$)
Float_extra	Extra storage space for variables (e.g., EGS ZLAST)	$m \times (\text{Real} \times 4)$ ($m \geq 0$)

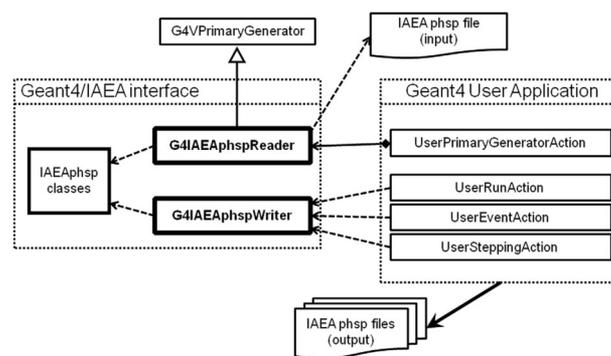
程的优势,在其成型后应用范围不断扩大,版本也一再更新升级。其应用范围已经从高能物理扩展到电子元器件和生物体的辐射损伤,再到放射防护等研究。Geant4目前最新版本为10.02版。

IAEA相空间数据格式标准最早在放疗MC模拟程序BEAMnc/EGSnrc中得到实现^[16-17]。基于Geant4的影响力,为方便使用不同程序研究人员之间进行交流,IAEA于2012年正式推出用C++编写的、面向Geant4的IAEA标准相空间文件接口^[18]。这种接口有两个类(class)组成:G4IAEAphspReader和G4IAEAphspWriter。前者负责把IAEA标准的相空间文件读入到Geant4程序中,作为粒子源(particle generator),后者负责将Geant4中模拟的射线写成IAEA标准的相空间文件。实现过程如图2所示。用户使用时只需要直接使用这两类的公共函数(public function)即可,无须涉及数据的读写过程和细节。文献[18]介绍了这两个类的使用方法,本文不再赘述。

3.2 Excel格式相空间文件到IAEA标准格式的转换

为了节省存储空间,目前绝大多数MC模拟程序输出的相空间文件均为二进制格式。尽管有人专门开发软件来分析这种格式的相空间数据^[19],但有时为了方便在通用的软件(如微软的excel)上进行分析,有些模拟程序和分析软件也能导出excel格式的文件,方便直接分析和作图。本文重点介绍如何将excel格式的相空间文件转换为IAEA标准格式的文件,同时也介绍了G4IAEAphspWriter的使用方法。

本文所用方法的基本思路是将excel格式的相空间文件读入到一个Geant4程序中,再将其射线数据



IAEA: International Atomic Energy Agency

图2 IAEA标准相空间文件格式与Geant4应用的接口

Fig.2 Interfaces between the phase-space file in IAEA standard format and Geant4 applications

写入到IAEA标准格式的文件中。本文采用Geant4自带的一个实例为模板,实现excel格式相空间文件的读入和IAEA标准格式文件的写出。

为了读取excel文件,本文采用免费的微软excel文件读写工具包xlsxio-0.2.8作为C++读入excel文件的接口。将该接口工具安装后,在程序中包含其头文件xlsxio_read.h即可使用相关的读入类xlsxio_reader。为了存储相空间数据,并应用于Geant4程序中,本研究定义了一个类PhaseSpaceFile,其头文件如下:

```
class PhaseSpaceFile
{
public:
    PhaseSpaceFile();
    ~PhaseSpaceFile();
public:
```

```
G4int ReadFile(G4String,G4double*);
static PhaseSpaceFile* GetInstance();
G4ThreeVector GetPosition() {return new
position;}
G4ThreeVector GetDirection() {return new
direction;}
G4doubleGetEnergy(){return newenergy;}
void DoOnCalled();
private:
G4ThreeVector position;
G4ThreeVector direction;
G4double energy;
static PhaseSpaceFile* fInstance;
G4long inde;
G4double* datapointer;
};
```

其中,ReadFile()用于调用xlsxio-0.2.8的读入函数,从excel文件中读入相空间数据。GetInstance()用于Geant4程序中初始化和调用PhaseSpaceFile类,GetPosition()、GetDirection()和GetEnergy()用于Geant4程序获取相空间数据,每次获取一个粒子的数据。DoOnCalled()则是为Geant4准备要调用的数据,例如指定相空间所在平面的z坐标,根据excel相空间数据算出粒子的运动方向等。

图3所示为原始的excel相空间数据。

	A	B	C	D	E
1	x, microns	y, microns	vx, microns/s	vy, microns/s	vz, microns/s
2	-179.7764684	-21.01085216	1.17984E+12	-4.31624E+11	2.998E+14
3	830.2802201	344.7256935	-4.86081E+12	-2.09012E+12	2.997E+14
4	834.1016429	232.8780779	-5.00989E+12	-1.45512E+12	2.997E+14
5	840.5289618	204.2978492	-4.95435E+12	-1.27027E+12	2.997E+14
6	-297.1173388	337.9677468	2.21722E+12	-1.95294E+12	2.998E+14
7	69.92876775	-3.208504099	-2.88918E+11	-4.09009E+11	2.998E+14
8	-1055.094958	-321.5333012	6.20306E+12	2.25183E+12	2.997E+14
9	-294.544438	-45.26005197	2.20533E+12	5.34874E+11	2.998E+14
10	197.5215455	299.7776562	-1.53329E+12	-1.43461E+12	2.998E+14

All photons have energy of 17.5 keV, and all weights are 1.

图3 原始的excel相空间数据

Fig.3 Original phase-space data in excel

接下来只需要在PrimaryGeneratorAction的构造函数中初始化G4ParticleGun并定义粒子类型(如果有多种粒子,则要放到下一个函数中定义)。方法如下:

```
B1PrimaryGeneratorAction::B1PrimaryGenerator-
Action()
:G4VUserPrimaryGeneratorAction(), fParticleGun(0)
{
```

```
fParticleGun = new G4ParticleGun();
G4ParticleTable* particleTable =
G4ParticleTable:: GetParticleTable();
G4String particleName;
G4ParticleDefinition* particle=
particleTable->FindParticle(particleName="gam-
ma");
fParticleGun->SetParticleDefinition(particle);
}
```

然后在GeneratePrimaries函数中调用PhaseSpaceFile的相关函数读入粒子的数据。这个函数是在Geant4中每次开始一个新的事件(event)时要调用的。方法如下:

```
void B1PrimaryGeneratorAction::GeneratePrimaries
(G4Event* anEvent)
{
PhaseSpaceFile* phspfile = PhaseSpaceFile::
GetInstance();
phspfile->DoOnCalled();
G4ThreeVector aposition=phspfile->GetPosition();
G4ThreeVector adirection = phspfile->GetDirec-
tion();
G4double kineticenergy = phspfile->GetEnergy();
aposition = aposition/1000; //unit conversion
fParticleGun->SetParticlePosition(aposition);
fParticleGun->SetParticleMomentumDirection
(adirection);
fParticleGun->SetParticleEnergy(kineticenergy);
fParticleGun->GeneratePrimaryVertex(anEvent);
}
```

运行示例程序,可见成功读入了excel格式的相空间数据(图4)。

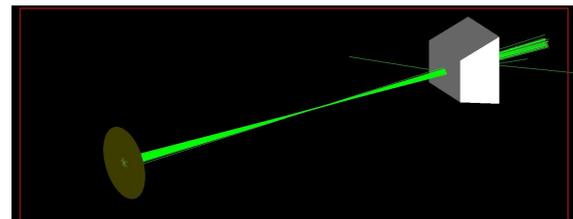


图4 从相空间平面(左侧圆)出射的X射线被物质(水)散射
Fig.4 X-ray beam from the phase-space plane (the circle shown on the left) scattered by water

最后将相空间数据写到IAEA标准格式的文件中,需要在Geant4的运行(Run)、事件(Event)和步进(Step)3个层次上调用接口类G4IAEAphspWriter的相关函数,

并在 `BeginOfRunAction` 函数中定义文件名和收集相空间数据的平面位置(z 坐标)。方法如下:

```
void B1RunAction::BeginOfRunAction(const
G4Run* aRun)
{
    G4IAEAphspWriter* IAEAWriter =
        G4IAEAphspWriter::GetInstance();
    IAEAWriter->SetZStop(0.0001);
    IAEAWriter->SetFileName("excel2iaea");
    IAEAWriter->BeginOfRunAction(aRun);
}
void B1RunAction::EndOfRunAction(const G4Run*
aRun)
{
    G4int nofEvents = aRun->GetNumberOfEvent
    ();
    if (nofEvents==0) return;
    G4IAEAphspWriter::GetInstance()->EndOfRun
    Action(aRun);}
void B1EventAction::BeginOfEventAction(const
G4Event* aEvent)
{
    G4IAEAphspWriter* phspWriter =
        G4IAEAphspWriter::GetInstance();
    phspWriter->BeginOfEventAction(aEvent);
}
void B1SteppingAction::UserSteppingAction(const
G4Step* step)
{
    G4IAEAphspWriter::GetInstance()->UserStep-
    pingAction(step);
}
```

由于 excel 相空间数据对应的射线实际位置为 $z=0$ (射束初始 z 坐标), 只须将准备写出的相空间数据所在平面的 z 坐标设成稍稍大于该坐标即可得到与原相空间数据几乎完全相同的数据(本例中设成 0.000 1 mm)。G4IAEAphspWriter 能自动生成两个文件, 一个头文件, 另一个是数据文件。这两个文件名的前半部分由 `SetFileName` 函数来定义, 随后加入 z 坐标信息, 扩展名则分别是 .IAEAheader 和 .IAEAphsp。本例中产生的 IAEA 相空间文件为 excel2iaea_0.0001.IAEAheader 和 excel2iaea_0.0001.IAEAphsp。

4 讨论和结论

为方便采用 IAEA 标准的研究人员使用 excel 格式的相空间数据, 本研究提出了一种方法, 用 Geant4 实现 Excel 格式相空间文件到 IAEA 标准格式转换。应该指出的是, 虽然本文采用的相空间数据相对比较简单, 未

涉及不同权重和能量, 粒子种类也是单一的, 但本文介绍的方法可适用于任何相空间数据。如有更多相空间变量, 只需要简单扩展 PhaseSpaceFile 的函数和变量, 然后在 GeneratePrimaries 增加相应的函数调用即可, 而 G4IAEAphspWriter 的使用方法是完全不变的。

【参考文献】

- [1] LOVELOCK D M, CHUI C S, MOHAN R. A Monte Carlo model of photon beams used in radiation therapy[J]. Med Phys, 1995, 22(9): 1387-1394.
- [2] RODRIGUES A, SAWKEY D, YIN F F, et al. A Monte Carlo simulation framework for electron beam dose calculations using Varian phase space files for TrueBeam linacs[J]. Med Phys, 2015, 42(5): 2389-2403.
- [3] TOWNSON R W, JIA X, TIAN Z, et al. GPU-based Monte Carlo radiotherapy dose calculation using phase-space sources[J]. Phys Med Biol, 2013, 58(12): 4341-4356.
- [4] TOWNSON R W, ZAVGORODNI S. A hybrid phase-space and histogram source model for GPU-based Monte Carlo radiotherapy dose calculation[J]. Phys Med Biol, 2014, 59(24): 7919-7935.
- [5] BARTZSCH S, LERCH M, PETASECCA M, et al. Influence of polarization and a source model for dose calculation in MRT[J]. Med Phys, 2014, 41(4): 041703.
- [6] CHAVES A, LOPES M C, ALVES C C, et al. A Monte Carlo multiple source model applied to radiosurgery narrow photon beams[J]. Med Phys, 2004, 31(8): 2192-2204.
- [7] PAPACONSTADOPOULOS P, SEUNTJENS J. A source model for modulated electron radiation therapy using dynamic jaw movements[J]. Med Phys, 2013, 40(5): 051707.
- [8] RODRIGUEZ M, SEMPANU J, FOGLIATA A, et al. A geometrical model for the Monte Carlo simulation of the TrueBeam linac[J]. Phys Med Biol, 2015, 60(11): N219-N229.
- [9] NWANKWO O, CLAUSEN S, SCHNEIDER F, et al. A virtual source model of a kilo-voltage radiotherapy device[J]. Phys Med Biol, 2013, 58(7): 2363-2375.
- [10] YUAN J, RONG Y, CHEN Q. A virtual source model for Monte Carlo simulation of helical tomotherapy[J]. J Appl Clin Med Phys, 2015, 16(1): 4992.
- [11] TACKE M B, SZYMANOWSKI H, OELFKE U, et al. Assessment of a new multileaf collimator concept using GEANT4 Monte Carlo simulations[J]. Med Phys, 2006, 33(4): 1125-1132.
- [12] KEALL P J, SIEBERS J V, LIBBY B, et al. Determining the incident electron fluence for Monte Carlo-based photon treatment planning using a standard measured data set[J]. Med Phys, 2003, 30(4): 574-582.
- [13] LIU D, POON E, BAZALOVA M, et al. Spectroscopic characterization of a novel electronic brachytherapy system[J]. Phys Med Biol, 2008, 53(1): 61-75.
- [14] BAZALOVA M, ZHOU H, KEALL P J, et al. Kilovoltage beam Monte Carlo dose calculations in submillimeter voxels for small animal radiotherapy[J]. Med Phys, 2009, 36(11): 4991-4999.
- [15] CAPOTE R, JERAJ R, MA C M, et al. Phase-space database for external beam radiotherapy summary report of a consultants' meeting [R]. International Atomic Energy Agency (IAEA). 2006: 19.
- [16] ROGERS D W, FADDEGON B A, DING G X, et al. BEAM: a Monte Carlo code to simulate radiotherapy treatment units[J]. Med Phys, 1995, 22(5): 503-524.
- [17] 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.
- [18] CORTES-GIRALDO M A, QUESADA J M, GALLARDO M I, et al. An implementation to read and write IAEA phase-space files in GEANT4-based simulations[J]. Int J Radiat Biol, 2012, 88(1-2): 200-208.
- [19] NEICU T, ALJARRAH K M, JIANG S B. A software tool for 2D/3D visualization and analysis of phase-space data generated by Monte Carlo modelling of medical linear accelerators[J]. Phys Med Biol, 2005, 50(20): N257-N267.

(编辑: 黄开颜)