

# X射线在介质中的剂量分布计算<sup>\*</sup>

刘艳梅<sup>1,2;1)</sup> 薛定宇<sup>1</sup> 徐心和<sup>1</sup> 董再励<sup>3</sup> 陈震<sup>1</sup>

1(东北大学人工智能与机器人研究所 沈阳 110004)

2(沈阳航空工业学院 沈阳 110034)

3(中国科学院沈阳自动化研究所机器人学重点实验室 沈阳 110016)

**摘要** 研究了放射治疗中X射线在介质中的输运过程, 编程实现了基于蒙特卡罗方法的剂量计算。并在便于图形处理的软件Matlab中对光子输运结果进行了可视化处理。对X射线在均匀介质和非均匀介质中的蒙特卡罗模拟结果与实测结果、其他蒙特卡罗软件模拟结果进行了比较, 结果符合较好。实验结果表明该方法既可以获得很快的仿真速度, 又能得到精确直观的剂量计算结果, 为提高放射治疗水平具有重要的指导意义和应用价值。

**关键词** 光子输运 剂量计算 蒙特卡罗 非均匀介质

## 1 引言

X射线放射治疗作为治疗肿瘤的手段, 其研究内容直接关系到肿瘤病人的生存质量和生命持续情况, 剂量计算一直是放射治疗中的重点和难点, 对放疗效果起着决定性的作用。计算X射线在介质中的剂量分布本质是求解粒子的Boltzmann输运方程。X射线(光子)在介质中传输的基本规律, 虽然可以用传输方程来描述, 但在解传输方程时会遇到很多困难, 例如如何处理介质非均匀性、复杂几何结构等。采用公认的“黄金标准”——蒙特卡罗(Monte Carlo)方法进行剂量计算, 是解决这一问题的有效方法<sup>[1]</sup>。蒙特卡罗方法间接解出Boltzmann输运方程来计算剂量分布, 近似较少, 更接近真实情况, 被称作“理论上的实验”。在放射治疗剂量计算方面, 由于蒙特卡罗方法在计算速度方面的不足, 在现实中应用很少, 但随着计算机技术的飞速发展, 蒙特卡罗方法作为剂量计算最精确的方法, 将成为放射治疗的首选<sup>[2]</sup>, 因此, 从研究的前瞻性和实用性出发, 研究基于蒙特卡罗方法的放射治疗剂量计算是很有价值的。本文对放射治疗中光子的输运过程进行了蒙特卡罗模拟, 并对计算结果进行了可视化处理。结果表明了该方法既可以获得很快的仿真

速度, 又能得到直观的仿真结果图形, 对数字医学的后续研究具有指导意义。

## 2 光子在介质中的输运过程

计算精确的光吸收剂量分布, 就必须深入了解光子与物质相互作用的物理机制。光子与物质的相互作用是放疗的物理基础, 能量在十几keV到十几MeV范围内的光子与物质的相互作用主要有3类过程, 光电效应, 康普顿效应和电子对效应<sup>[3]</sup>。其他作用过程与上述3种主要过程相比都是次要的。光子在介质中的运动过程, 本身就具有随机性质, 显然, 光子的这种随机运动过程, 是一种马尔可夫过程。所以, 只要粒子与原子碰撞的规律在物理上清楚, 那么光子运动的马尔可夫过程完全能够用蒙特卡罗方法正确地模拟, 从而得到所要的解<sup>[4]</sup>。光子在介质中运动时, 它的空间位量 $P$ 不断地发生改变, 而且它在运动过程中, 要同介质原子发生碰撞, 结果或者每个光子的能量 $E$ 与运动方向 $R$ 发生改变, 或者是被介质吸收了, 或者是由于发生反应而发出次级粒子, 因此, 对一个光子随机运动的跟踪过程就归结为光子状态参数 $S(P, R, E)$ 变化的过程。蒙特卡罗方法模拟光子在介质中的输运

2005-12-29 收稿

\* 国家自然科学基金(60475036)资助

1) E-mail: lymcml@126.com

过程,也即大量记录每个光子在介质中的行迹.其步骤总体上讲有4步:1)根据入射条件确定源光子状态;2)确定光子行进的方向和下一次碰撞的位置;3)确定在该位置光子与介质发生反应类型;4)追踪次级粒子(光子或电子)返回第二步.如此循环计算,直到粒子能量小于某一设定值,或者粒子逸出介质上下表面时就结束对该粒子的跟踪.然后返回第一步记录另一光子,直到所设定的光子数全部跟踪完毕<sup>[5]</sup>.

## 2.1 源光子状态的确定

源光子抽样的目的是产生光子的初始状态  $S_0(P_0, R_0, E_0)$ , 亦即从光子源中随机选出一个样本光子, 确定入射到介质外表面时的位置  $P_0$ 、飞行方向  $R_0$ 、能量  $E_0$ . 光子“出生”位置和初始方向的确定与系统的几何情况有关, 这里设初始状态方向按垂直入射, 医用X刀一般采用直线加速器产生X射线, 在轫致辐射的情况下, 韡致辐射能谱的函数形式如下式<sup>[6]</sup>

$$g(w) = \left[ 1 + (1-w)^2 - \frac{2}{3}(1-w) \right] + \frac{(1-w)}{9 \ln \left( \frac{183}{Z^{1/3}} \right)}, \quad (1)$$

式中  $w = E_\gamma/E$ ,  $E$  是电子能量,  $E_\gamma$  是轫致辐射光子能量,  $Z$  是物质的原子序数. 根据轫致辐射能谱的分布, 对轫致辐射光子能量采用舍选抽样方法进行抽样<sup>[7]</sup>.

$$\xi \xrightarrow{\text{随机数}} M\xi \leq g(\xi) \xrightarrow{\text{随机数}} N \xrightarrow{\text{随机数}} X_f = \xi, \quad (2)$$

其中  $g(\xi) \leq M$ ; 这里设电子打在铅靶上,  $M=1.4$ ,  $\xi$  为  $0-1$  之间随机数. 抽样所得为  $X_f$ , 则光子初始能量为  $E_\gamma = EX_f$ .

## 2.2 相互作用类型的确立

假定能量为  $E$  的光子在  $P$  处同物质发生了碰撞, 要随机地确定光子和物质发生何种反应: 取一随机数  $\xi$ , 若  $\xi \leq \frac{\mu_\tau}{\sum \mu}$ , 则发生光电效应, 若  $\frac{\mu_\tau}{\sum \mu} \leq \xi \leq \frac{\mu_\kappa + \mu_\tau}{\sum \mu}$ ,

则发生康普顿效应, 若  $\frac{\mu_\kappa + \mu_\tau}{\sum \mu} \leq \xi \leq 1$  则发生电子对效应. 其中  $\sum \mu = \mu_\tau + \mu_\sigma + \mu_\kappa$ ,  $\sum \mu$  为总反应截面;  $\mu_\tau$  为光电效应截面;  $\mu_\sigma$  为电子对效应截面;  $\mu_\kappa$  为康普顿效应截面. 本文采用尽可能准确的截面数据, 光电截面和电子对效应截面引自蒙特卡罗模拟程序DPM, DPM具有能量范围宽的截面数据, 其元素和介质材料齐全, 可提供92种元素的截面数据, 并可以由用户自己生成混合物、化合物的截面数据, 在跟

踪粒子时, 对粒子的每一种能量, 先从截面库中取出需要的核数据, 再用插值方法求出相应能量的各种截面数据. 康普顿总截面由Klein-Nishina公式算出.

## 2.3 出射光子能量、方向的确定

光子同物质发生反应后, 光子的能量和运动方向都发生变化, 具体怎样变化, 需要抽样决定.

### 1) 光电效应

光子的波长为  $\lambda$ , 频率为  $\nu$ , 则其能量为  $h\nu$ , 能量为  $h\nu$  的光子与物质的原子轨道电子发生相互作用, 全部初始能量  $h\nu$  由被撞击的原子所吸收, 然后打出一个具有动能  $E$  的电子(一般为  $K$  层或  $L$  层电子), 这个过程称为光电效应.

$$E = h\nu - E_b - E_a = h\nu - E_b, \quad (3)$$

$h\nu$  为入射光子的能量;  $E_b$  为轨道电子的结合能,  $E_a$  为反冲原子的动能(可忽略不计).  $E$  与光电子发射角  $\theta$  无关(如图1所示). 光电子的角分布随光子能量而变化. 当光子能量较低时大部分光电子朝侧向发射, 即沿入射光子电矢量的方向发射. 随着光子能量的升高, 光电子射向前方的比例逐渐加大.

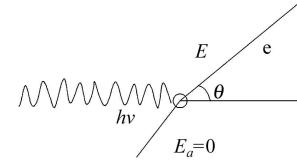


图 1 光电效应

### 2) 康普顿效应

当具有能量为  $h\nu$  的光子与原子内一个轨道电子相互作用时, 光子交给轨道电子部分能量后, 其频率发生改变并与入射方向成  $\theta$  角发射(康普顿散射光子), 获得足够能量的轨道电子与光子入射方向成  $\phi$  角方向射出(康普顿反冲电子), 此种效应称为康普顿效应(如图2). 入射光子动量为  $h\nu/c$ . 在受到电子散射后, 光子的波长变为  $\lambda'$ , 频率变为  $\nu'$ , 散射角为  $\theta$ , 而反冲电子与入射光子的方向成  $\phi$  角射出. 把原子电子看作自由电子, 则根据动量守恒和能量守恒有

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta), \quad (4)$$

其中  $h$  是普朗克常数,  $m_0$  是电子的静止质量,  $c$  是真空中的光速. 由上式可以推导出散射光子的能量为

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}, \quad (5)$$

式中  $\alpha = \frac{h\nu}{m_0 c^2}$  是入射光子能量与电子静止能量的比值. 反冲电子的动能等于入射光子和散射光子能量之

差, 即:

$$E = h\nu - h\nu' = h\nu \frac{\alpha(1-\cos\theta)}{1+\alpha(1-\cos\theta)}, \quad (6)$$

散射光子数的角分布:

$$\frac{d_e\sigma}{d\theta} = \frac{d_e\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta. \quad (7)$$

作用截面采用 Klein-Nishina 公式:

$$\sigma = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left[ \frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{\ln(1+2\alpha)}{\alpha} \right] + \frac{\ln(1+2\alpha)}{2\alpha} - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right\}, \quad (8)$$

式中  $r_e = \frac{e^2}{mc^2} = 2.818 \times 10^{-15} \text{ m}$  是电子经典半径.

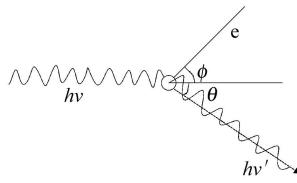


图 2 康普顿效应

这里采用乘加抽样方法抽样散射光子能量. 然后利用式(5)计算其散射角  $\theta$ . 康普顿电子的反冲角  $\phi$  与散射角  $\theta$  满足以下关系式:

$$\cot\phi = (1+\alpha)\tan\frac{\theta}{2}. \quad (9)$$

求出  $\theta$  值, 另一个的参数  $\phi$  可以用分析方法给出.

### 3) 电子对效应

当入射光子从原子核旁经过时, 在原子核场或原子的电子场中, 一个光子转化成一对正、负电子, 这就是电子对效应(如图3所示). 正负电子能量之和等于入射光子能量<sup>[8]</sup>, 有  $h\nu = E^+ + E^-$ , 这里  $E^+$  是总能量. 能量为  $E^+$  的正电子的微分截面见文献[8]. 正负电子对角均匀分布, 方向相反.

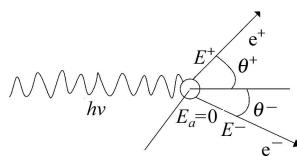


图 3 电子对效应

## 2.4 光子碰撞过程结束条件

从以上的讨论可见, 光子可以产生电子, 电子也可以产生光子, 实际物理过程是光子与电子的耦合输运过程. 对于两种粒子的耦合输运问题, 使用蒙特卡罗方法模拟时, 采用“字典编辑多支方法”处理. 首先确定模拟哪种粒子, 存储哪种粒子. 例如确定模拟电

子, 存储光子. 即光子与原子核发生作用时, 如发生康普顿散射时, 把光子存储起来, 去模拟电子. 如发生其他反应, 直接模拟电子. 在电子模拟过程中, 如产生光子, 存储起来, 继续模拟电子. 电子历史终止后, 按照“后进先出”的原则取出存储的光子. 在粒子自系统中逸出或粒子能量减少至某一值时, 粒子将不再被跟踪. 粒子游动轨迹终止后, 回到源光子抽样开始对另一光子随机游动进行模拟, 直到预定的全部光子都模拟完毕, 整个粒子跟踪过程就结束了.

## 3 模拟结果及验证

DPM 是一新推出的专门为放疗计划系统中光子和电子剂量计算进行优化的蒙特卡罗模拟程序, 其精度相当高, 计算速度也比较快<sup>[9]</sup>. 采用 Fortran 语言编写, 运行于 Linux 环境下, 以 DPM 为基础, 对其进行移植和开发. 目的是建立一个可以方便地在普通微机上实现的 Monte Carlo 剂量计算程序. 可以结合实际需要, 建立了基于均匀介质和非均匀介质的蒙特卡罗剂量计算模型; 同时为了更加直观准确的表示剂量分布, 帮助医生准确的判断放射剂量的分布是否满足治疗的需求, 必须使用可视化的方法表示剂量计算的结果. 由于 MATLAB 的强大的图形处理功能, 本文应用 MATLAB 处理放射剂量场的剂量分布显示, 使问题大大简化. 首先在 MATLAB 中调用 Fortran 的计算结果, 需要解决 MATLAB 和 Fortran 的接口问题. 办法是在 MATLAB 中把 Fortran 程序编译为 MEX 文件, 在 MATLAB 中执行 Fortran 程序. 这样就可以在内存中直接调用 Fortran 的计算结果, 不需要对硬盘的读写, 运行速度较快. 然后编写 MATLAB 程序, 对剂量计算结果进行可视化处理.

### 3.1 均匀介质

DPM 构造的均匀介质为  $30\text{cm} \times 30\text{cm} \times 10\text{cm}$  的立方体水介质作为蒙特卡罗计算模型. 设单元体积为  $0.5\text{cm} \times 0.5\text{cm} \times 0.1\text{cm}$ . 平行正入射. 加速器的电子能量为 6MeV. 跟踪 15 万个入射光子(由电子在靶中的轫致辐射产生), 射野为  $10\text{cm} \times 10\text{cm}$ . 图 4 给出了在相同初始条件下辽宁省肿瘤医院提供的实际测量的三维水箱数据与 DPM 剂量计算得出的百分深度-剂量曲线的对比结果, (a) 图中曲线为 6MeV 电子的轫致辐射光子产生的不同射野的百分深度-剂量曲线, 突出的粗线为  $10\text{cm} \times 10\text{cm}$  射野的实测水箱百分深度-剂量数据, (b) 图为 DPM 剂量计算得出的百分深度-剂量曲

线, 可见二者结果符合较好。深度剂量曲线是最常规的要求, 用来显示二维的深度和剂量关系的图形。因为射线的光束有一定的大小, 而且在与介质作用时向周围散射, 可以做出很多平面的深度剂量曲线。根据实际情况, 选择轴线上的曲线。这样可以清晰地显示整体的分布。从模拟结果可以看出, 随着介质层深度增加入射粒子有明显衰减, 但是在靠近介质表面的浅层内, 随着深度的增加, 到达每一深度的次级带电粒子数目还是增加的, 所以在介质浅层内吸收剂量随深度增加而增加, 一直到由于深度增加而增加的次级带电粒子数目正好等于因衰减而释出的次级带电粒子数目时, 吸收剂量达到极大值。此后, 随深度增加吸收剂量按指数规律成一定比例减少。

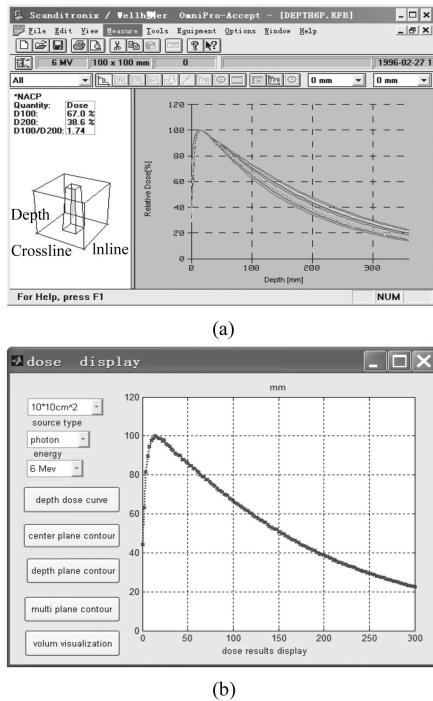


图 4 (a) 实验测量水箱深度-剂量曲线;  
(b) DPM 计算所得深度-剂量曲线

### 3.2 非均匀介质

模拟实验中考虑人体内少量重要器官, 构造几何体为  $30\text{cm} \times 30\text{cm} \times 30\text{cm}$  的脑介质, 单元格体积为  $0.5\text{cm} \times 0.5\text{cm} \times 0.2\text{cm}$ , 入射电子能量为  $10\text{MeV}$ , 跟踪  $1.5 \times 10^6$  个光子。图 5(a) 给出了 EGSNRC<sup>[10]</sup>, DPM 得出的纵向光子相对深度-剂量曲线, 二者结果符合较好。图 5(b) 显示沿深度方向轴线平面的等剂量线。图 5(c) 显示了多层深度处的等剂量线。为了仔细研究某

一深度  $x$ - $y$  平面的剂量分布情况, 可用此图形详细的进行分析, 绘图的深度值可以根据需要给定。图 5(d) 显示某一剂量值的等值面, 三维剂量显示能够更直接、更形象地观察剂量分布, 并能直接观察到肿瘤和关键组织上剂量分布的均匀度。

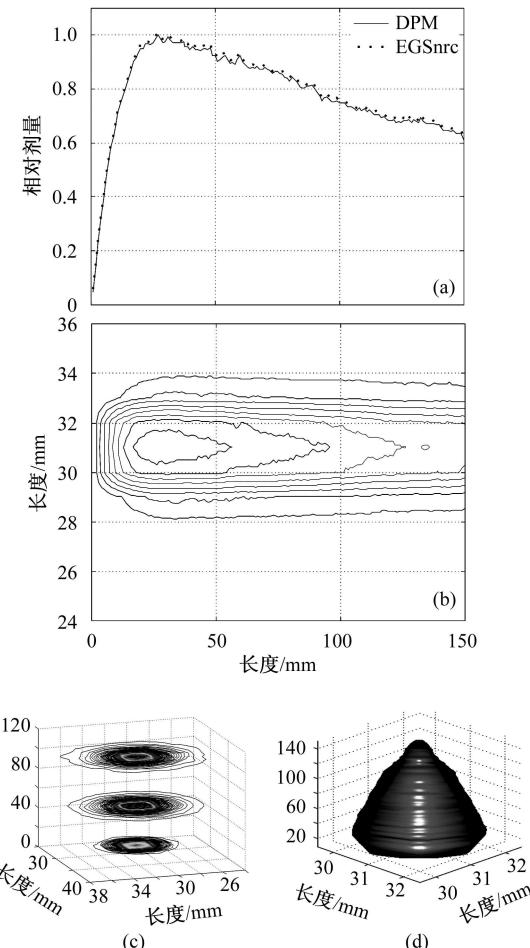


图 5 剂量计算结果的图形显示

### 4 结论

放射治疗的剂量计算采用蒙特卡罗方法, 能够得到很高的计算精度。本文通过改写蒙特卡罗软件——DPM, 可实现任意设定的仿真模型的剂量计算, 并使它和 MATLAB 数据交互, 可以方便地显示任意平面的等剂量线, 也可以显示任意指定百分剂量值的体视化曲面。这样既获得了很快的仿真速度, 又得到了直观的仿真结果图形, 为提高放射治疗水平具有重要的指导意义和应用价值。

### 参考文献(References)

- ## 参考文献(References)

  - 1 Ding K H, Tsang L, Shih S E. Microwave and Optical Technology Letters, 2001, **30**(2): 187—192
  - 2 WANG Jian-Gang, WANG Gui-Ying, XU Zhi-Zhan. Acta Optica Sinica, 2001, **21**(2): 155—157 (in Chinese)  
(王建岗, 王桂英, 徐至展. 光学学报, 2001, **21**(2): 155—157)
  - 3 QIU You-Heng, DENG Li, YING Yang-Jun et al. HEP & NP, 2003, **27**(10): 936—942 (in Chinese)  
(邱有恒, 邓力, 应阳君等. 高能物理与核物理, 2003, **27**(10): 936—942)
  - 4 LONG Ji-Dong, SHI Jin-Shui, YU Hai-Jun et al. HEP & NP, 2004, **28**(8): 1238—1243 (in Chinese)  
(龙继东, 石金水, 禹海军等. 高能物理与核物理, 2004, **28**(8): 1238—1243)
  - 5 Andreo P. Phys. Med. Biol., 1991, **36**(9): 861—920
  - 6 TANG Xiao-Wei et al. Particles Physics Experiment Method. Beijing: Higher Education Press, 1983. 13—14  
(唐孝威等. 粒子物理实验方法. 北京: 高等教育出版社, 1983. 13—14)
  - 7 PEI Lu-Cheng, ZHANG Xiao-Ze. Monte Carlo Method and Application in Particle Transport Problem. Beijing: Science Press, 1980. 58—60 (in Chinese)  
(裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用. 北京: 科学出版社, 1980. 58—60)
  - 8 TANG Xiao-Wei et al. Particles Physics Experiment Method. Beijing: Higher Education Press, 1983. 17—18  
(唐孝威等. 粒子物理实验方法. 北京: 高等教育出版社, 1983. 17—18)
  - 9 Josep Sempau, Wilderman Scott J, Bielajew Alex F. Phys. Med. Biol., 2000, **45**: 2263—2291
  - 10 [http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/EGSnrc/EGSnrc\\_\(c\).NRC\\_Canada, 2002](http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/EGSnrc/EGSnrc_(c).NRC_Canada, 2002)

## Dose Calculation of X-Ray in Medium\*

LIU Yan-Mei<sup>1,2;1)</sup> XUE Ding-Yu<sup>1</sup> XU Xin-He<sup>1</sup> DONG Zai-Li<sup>3</sup> CHEN Zhen<sup>1</sup>

1 (Institute of Artificial Intelligence and Robotics, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

2 (Shenyang Institute of Aeronautical Engineering, Shenyang 110034, China)

3 (Robotics Laboratory, Shenyang Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

**Abstract** The photon transportation in radiotherapy is studied based on Monte Carlo method. The dose calculation based on the MC simulation package DPM has been carried out, and the results have been visualized using MEX technology of Matlab. The dose results of X-ray in homogeneity and inhomogeneity medium have been compared with experimental data and those of other MC simulation package, and these results all agree. The calculation method we proposed has the advantage of high speed and good accuracy, therefore, is applicable in practice.

**Key words** photon transportation, dose calculation, Monte Carlo, inhomogeneity medium

Received 29 December 2005

\* Supported by National Natural Science Foundation of China (60475036)

1) E-mail: lymcml@126.com