

Fizika Monte Karlo simulacija transporta fotona sa primenama u medicini

Predrag Marinković
Miloš Vujisić

**FIZIKA MONTE KARLO SIMULACIJA
TRANSPORTA FOTONA SA PRIMENAMA U MEDICINI**

Autori:

Dr Predrag Marinković

Redovni profesor Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu u penziji

Dr Miloš Vujisić

Docent Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu

Izdaje i štampa

Akademski misao, Beograd

Tiraž

200 primeraka

ISBN 978-86-7466-825-2

Mesto i godina izdanja: Beograd, 2020.

Predgovor

Ova knjiga namenjena je studentima koji na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu slušaju predmete osnovnih studija Nuklearna medicinska tehnika i Metode formiranja medicinske slike, kao i predmet Fizika medicinskog slikanja na master studijama. Od koristi je i studentima koji se na doktorskim studijama bave istraživanjima u oblasti primenjene nuklearne fizike. Nastala je na osnovu materijala za predavanja iz ovih predmeta, koje su autori držali na Elektrotehničkom fakultetu dugi niz godina.

U knjizi je detaljno tretiran samo transport fotona energija iznad 100 eV. Fotoni, prolazeći kroz materijal, mogu u fotoelektričnom ili Komptonovom efektu generisati elektrone, a u interakciji proizvodnje para, elektrone i pozitrona. Elektroni i pozitroni kreću se dalje kroz materijal, pri čemu je moguća anihilacija pozitrona sa nekim od elektrona sredine, što vodi generisanju nova dva (retko tri) fotona po interakciji. Atomi pobuđeni u interakciji sa upadnim fotonom relaksiraju se emisijom fluorescentnih fotona ili Oževih elektrona. Kao što je jasno, transport fotona je teško odvojiti od transporta elektrona. I pored toga, komercijalni Monte Karlo kodovi mogu tretirati samo transport fotona, ne vodeći računa o generisanim naelektrisanim česticama. Pokretanje spregnutog prenosa fotona i elektrona višestruko povećava trajanje simulacije. Transport elektrona ne obrađuje se u ovoj knjizi, jer je ona zamišljena kao izvor iz kog će studenti, na pomenutim kursevima, steći prva znanja o Monte Karlo simulaciji primenjenoj na transport zračenja, dok složenije simulacije prolaska elektrona i pozitrona kroz sredinu spadaju u napredne teme iz ove oblasti. Iz razmatranja je, iz istih razloga, izostavljeno praćenje proizvoda fotonuklearnih reakcija.

Monte Karlo metoda praćenja fotona zasniva se na probabilističkim predstavama svih relevantnih procesa vezanih za svaki pojedinačni foton u simuliranom polju zračenja. Zahvaljujući utemeljenosti na matematičkoj teoriji verovatnoće, Monte Karlo simulacije su veran odraz stohastičke prirode fizičkih pojava koje određuju istoriju fotona: emisije, propagacije kroz materijalnu sredinu i niza interakcija koje foton može da doživi, uključujući apsorpciju.

U ovoj knjizi fokus je na fizici transporta fotona, ali je znatna pažnja takođe posvećena problemima geometrijske reprezentacije i praćenja fotona kroz materijal. Kako je za razumevanje Monte Karlo simulacije neophodno znati osnovne postavke teorije verovatnoće i statistike, materija iz ove oblasti izložena je u prvom poglavlju, sa naglaskom na uzorkovanju (izvlačenju) vrednosti slučajne promenljive iz poznate raspodele. Drugo poglavlje se odnosi na geometrijsku predstavu u simulacionom modelu, treće na brojače u kojim se zapisuju rezultati simulacije, a četvrto na tehnike poboljšanja statističke sigurnosti rezultata Monte Karlo proračuna. Fizički modeli koji stoje u osnovi simulacija transporta fotona i detalji njihove algoritamske realizacije čine sadržaj petog poglavlja. Šesto poglavlje se odnosi na primenu Monte Karlo simulacija transporta fotona u medicini.

Jonizujuće i nuklearno fotonsko zračenje nalazi široku primenu u medicini. Uređaji poput rendgen aparata, CT, SPECT i PET skenera postali su standardne naprave u medicinskoj dijagnostici. Terapija fotonima srednjih i visokih energija je takođe već uobičajen način lečenja malignih bolesti. Stoga je poznavanje transporta fotona kroz materijal od suštinskog značaja u medicinskim primenama zračenja. Iako je transport fotona kroz sredinu moguće tretirati i analitički, Bolcmanovom transportnom jednačinom, zahvaljujući fleksibilnosti, pouzdanosti i sve većoj brzini izvršavanja Monte Karlo simulacije preuzimaju primat, ne samo u prekliničkim istraživanjima, već i u kliničkim uslovima rada. Monte Karlo tehnike transporta zračenja daju dragocen doprinos preciznom određivanju apsorbovanih doza u organima od radiografskih izlaganja pacijenata, proceni doza medicinskog osoblja, unapređenju kvaliteta uređaja za medicinsko slikanje i personalizovanom planiranju terapije zračenjem.

Sadržaj

1	Monte Karlo metod	1
1.1	Uvod	1
1.2	Funkcija gustine verovatnoće i funkcija raspodele slučajne promenljive	4
1.3	Metoda inverzije funkcije raspodele	6
1.3.1	Uniformna raspodela	6
1.3.2	Uzorkovanje dubine prodiranja fotona ili neutrona	11
1.3.3	Metoda inverzne transformacije ako je $f(x)$ dato kao histogram	14
1.3.4	Metoda inverzne transformacije za diskretne raspodele	15
1.4	Metoda odbacivanja	17
1.5	Mešoviti metod	25
1.6	Metod kompozicije	27
1.7	Metod konvolucije	36
1.8	Funkcija dve promenljive	39
1.8.1	Uniformna raspodela tačaka na površini sfere	41
1.8.2	Izbor slučajnog pravca kretanja čestica iz tačkastog izvora	42
1.8.3	Izbor uniformno raspoređenih tačaka na disku	43
1.8.4	Izbor uniformno raspoređenih tačaka na pravougaoniku	44
1.8.5	Uzorkovanje iz normalne raspodele	46
1.9	Funkcija više promenljivih	47
1.9.1	Uniformna raspodela tačaka u lopti	47
1.10	Zadaci	49
2	Mehanika simulacije	71
2.1	Geometrija	71
2.2	Definisanje geometrija problema	72
2.2.1	Geometrija predstavljena površinama	73
2.2.2	Kombinatorna geometrija	79
2.2.3	Vokselizovana geometrija	83

2.3	Položaj tačke u odnosu na površinu	83
2.4	Provera da li je tačka unutar ćelije	84
2.5	Presek putanje čestice sa granicom ćelije	85
2.6	Granični uslovi	87
2.6.1	Vakuumski ili "crni" granični uslov	87
2.6.2	Transparentni uslov	88
2.6.3	Refleksioni granični uslov ili uslov ogledala	88
2.6.4	"Beli" granični uslov	90
2.6.5	Periodični granični uslov	93
2.7	Tretman preseka poluprave sa površinom	95
2.7.1	Presek poluprave i ravni	95
2.7.2	Presek poluprave i sfere	100
2.7.3	Presek poluprave i elipsoida	104
2.7.4	Presek poluprave i cilindra	107
2.7.5	Presek poluprave i konusa	110
2.7.6	Presek poluprave i torusa	113
2.8	Generisanje slučajne putanje	113
2.9	Praćenje čestice	115
3	Brojači	119
3.1	Skalarni fluens	119
3.1.1	Estimator sudara	119
3.1.2	Estimator dužine puta	121
3.1.3	Površinski estimator	123
3.2	Struje	124
3.3	Estimator broja interakcija u jedinici zapremine	125
3.4	Estimator fluensa energije	126
3.5	Brojač deponovane energije	126
4	Procena nesigurnosti	129
5	Transport fotona	131
5.1	Tomsonovo rasejanje	133
5.1.1	Simulacija Tomsonovog rasejanja	138
5.2	Koherentno rasejanje	142
5.2.1	Diferencijalni efikasni presek	143
5.2.2	Atomski faktor oblika	145
5.2.3	Slučajno uzorkovanje polarnog ugla rasejanja	150
5.2.4	Totalni presek koherentnog rasejanja	164
5.2.5	Primeri	166
5.3	Nekoherentno rasejanje	169

5.3.1	Model Komptonovog rasejanja na slobodnom elektronu	169
5.3.2	Simulacija nekoherentnog rasejanja na slobodnom elektronu u miru	177
5.3.3	Model rasejanja na vezanim elektronima bez korekcije Klajn-Nišina formule	236
5.3.4	Model Komptonovog rasejanja sa uračunatom funkcijom nekoherentnog rasejanja	239
5.3.5	Model Komptonovog rasejanja na vezanom elektronu u atomu i Doplerovim efektom	246
5.4	Fotoelektrični efekat	269
5.4.1	Izbor tipa atoma na kome se dešava fotoelektrična interakcija	284
5.4.2	Izbor ljuske/podljuske u kojoj se desila jonizacija . . .	285
5.4.3	Simulacija inicijalnog pravca fotoelektrona	293
5.5	Relaksacije atoma	317
5.5.1	Prinosi	319
5.6	Proizvodnja para pozitron - elektron	325
5.6.1	Diferencijalni efikasni presek za proizvodnju para . . .	328
5.6.2	Totalni efikasni presek za proizvodnju para	336
5.6.3	Simulacija proizvodnje para u programu PENELOPE .	345
5.6.4	Simulacija u programu GEANT	355
5.6.5	Uzokovanje pravca elektrona i pozitrona	357
6	Monte Karlo u medicinskim primenama fotonskog zračenja	361
6.1	Pregled medicinskih primena fotonskog zračenja	361
6.2	Primeri primene Monte Karlo tehnika u medicinskoj radiografiji	363
6.3	Primeri primene Monte Karlo tehnika u nuklearnoj medicini .	367
6.4	Primeri primene Monte Karlo tehnika u fotonskoj radioterapiji	369
7	Prilozi	377
7.1	Prilog A	377
7.1.1	Jednorodan materijal	377
7.1.2	Homogena smeša različitih atoma	377
7.1.3	Hemijsko jedinjenje	379
7.1.4	Izotopski sastav	379
8	Tabele	381

Poglavlje 1

Monte Karlo metod

1.1 Uvod

Primena Monte Karlo metoda u transportu elementarnih čestica povezana je sa konstrukcijom prvog digitalnog racunara ENIAC¹, kao i sa imenima: Stanislav Ulam², Džon Fon Nojman³ i Nikolas Metropolis⁴, koji su 1947. godine predložili mogućnost statističkog načina rešavanja difuzije neutrona u fisionom materijalu.

Naziv "Monte Karlo metod" se odnosi na širok spektar matematičkih modela i algoritama čija je glavna karakteristika stohastički pristup, odnosno upotreba slučajnih brojeva u rešavanju različitih problema. Ime "Monte Karlo" (asocirajući na kockarnicu u Monaku) uveli su Ulam, Nojman i Metropolis 1946. godine, iako je sama ideja bila poznata od ranije.

Prvi simpozijum o Monte Karlo metodi održan je sredinom 1949. godine. Dalji napredak je sledio 1952. godine puštanjem u pogon računara MANIAC⁵. Pokazalo se da je razvoj Monte Karlo metode u transportu čestica u tesnoj vezi sa razvojem računara. Kada je dostignuta gornja granica snage računara sa jednim procesorom, otvorilo se široko polje paralelnog procesiranja pomoću

¹Računar ENIAC je konstruisan na Univerzitetu u Pensilvaniji u Filadelfiji. Pušten je u pogon marta 1945. godine. Sadržao je 18000 vakumskih elektronskih cevi sa duplim triodama i imao je 500000 tačaka lemljenja.

²Stanislaw Ulam, 1909-1984. godine, poljsko-američki matematičar i nuklearni fizičar. Učestvovao od 1943. godine u Menheten projektu konstrukcije termo-nuklearnog oružja u tajnoj laboratoriji u Los Alamosu. Radio je sa Edvardom Telerom (ocem "super" bombe) i Enrikom Fermijem.

³John fon Neumann, profesor matematike.

⁴Nicholas Metropolis, 1915-1999., grčko-američki fizičar.

⁵Laboratorija u Los Alamosu.

stotina procesora⁶. Da bi se postigla dobra statistika, potrebno je posmatrati veliki broj istorija. Kako je svaka istorija, u stvari, u mnogim slučajevima sudbina jedne čestice nezavisno od sudbine drugih, jasno je da je Monte Karlo proračun po svojoj suštini pogodan za paralelno procesiranje.

U svojoj najjednostavnijoj formi, Monte Karlo se sastoji u simuliranju konačnog broja, recimo N , istorija čestica korišćenjem generatora slučajnih brojeva. U svakoj istoriji čestice generišu se slučajni brojevi i koriste da se uz pomoć njih iz raspodela gustine verovatnoće odaberu uglovi rasejanja, dužine slobodnih puteva, vrsta interakcije itd. Ako je cilj proračuna određivanje matematičkog očekivanja (srednje vrednosti \bar{x}) neke veličine, srednja vrednost

koja se dobije proračunom je $\hat{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n$, gde je x_n doprinos n -te istorije toj veličini. Kako Monte Karlo proračun napreduje, beleže se vrednosti x_n dobijene u svakoj istoriji u cilju određivanja procene srednje vrednosti \hat{x} koja se dobija na kraju proračuna. Tada se radi o analognoj Monte Karlo tehnici. Istorija svake čestice se simulira egzaktno u skladu sa zakonima prirode. Ona se prati od svog nastanka, pa do nestanka, odnosno završetka njene istorije.

Odmah se postavlja pitanje koliko je dobra procena \hat{x} u odnosu na stvarnu srednju vrednost. Nesigurnost pri određivanju srednje vrednosti \hat{x} se smanjuje sa porastom broja istorija N i u mnogim slučajevima je srazmerna sa $N^{-1/2}$. Ako svaka ili skoro svaka istorija čestice doprinese srednjoj vrednosti, nju je lako proceniti. Međutim, u slučaju penetracije čestica kroz debeo štit mnogo je teže odrediti koja je preciznost takvog proračuna. Na primer, ako štit atenuira čestice faktorom 10^6 , tada će jedna od milion istorija čestica doprineti rezultatu. Ali i ovakvi problemi se uspešno mogu tretirati Monte Karlo tehnikama kojima se izbegava dosledno poštovanje analogne simulacije i koriste stohastičke tehnike kojima se redukuje varijansa. Kaže se da se radi o neanalognoj Monte Karlo tehnici simulacije. Zaobilazi se analogna simulacija i pristupa se nekoj vrsti "prevare" u kockanju koje zovemo Monte Karlo, sve u cilju smanjenja vremena proračuna. Uobičajeno se koriste sledeće tehnike redukcije varijanse: potiskivanje apsorpcije⁷, prekid istorije i ruski rulet⁸, deljenje i ruski rulet⁹, forsiranje sudara¹⁰ i pomerenost izvora¹¹.

Monte Karlo simulacija obuhvata niz činjenica o kojima je potrebno razmišljati:

⁶"Connection Machine" ima 65536 procesora koji rade paralelno.

⁷Absorption suppression.

⁸History termination and Russian Roulette.

⁹Splitting and Russian Roulette.

¹⁰Forced Collisions.

¹¹Source Biasing.