

BNCT 蒙特卡洛剂量计算的混合网格算法研究

邱有恒^{1;1)} 邓力² 应阳君²

1 (中国工程物理研究院北京研究生部 北京 100088)

2 (北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室 北京 100088)

摘要 在硼中子俘获治疗 (BNCT) 的蒙特卡洛 (MC) 剂量计算中, 通常使用单一的网格模式, 如 16mm, 8mm, 4mm. 使用细网格计算资源太大, 使用粗网格, 计算精度不够, 为此, 根据粒子穿透深度和计数量的变化梯度, 采用混合网格模拟计算, 达到了细网格的精度, 时间仅为细网格的 37%.

关键词 蒙特卡洛模拟 吸收剂量率 硼中子俘获治疗

1 引言

中子俘获治疗 (NCT) 就是在细胞的层次上, 将具有高的直线能量转移 (LET) 的带电粒子有选择性地定位辐射到肿瘤区的一种现代治疗技术. 具有超常热中子吸收截面 (3840 barns) 的 ^{10}B 吸收热中子后迅速变为 ^{11}B , 紧接着分解为具有总动能为 2.33 MeV 的 ^4He 和 ^7Li 粒子, 这两种粒子飞行方向相反, 在一条直线上. 粒子在肌体中的作用范围约为 12—13 μm (同细胞大小可比拟). 该反应构成了硼中子俘获治疗 (BNCT) 的物理基础. Gordon Locher 于 1936 年首先提出了 BNCT 的原理, 假定硼可以有选择性地富集于肿瘤区, 被热中子照射后, 肿瘤区吸收的剂量就远比正常组织高, 可以达到杀死癌细胞, 保护正常细胞的目的^[1].

剂量计算面临一系列的问题: 如何精确地描述模型, 体内各种核反应参数的精确确定等, 更重要的是要研制一套合理有效的剂量规划软件, 针对不同患者能迅速自动得出适合于该患者的照射剂量, 最后, 由于硼的浓度在注入人体后是变化的, 只有在照射前测得的浓度才是剂量计算的有效依据, 因此剂量计算要求在短时间内完成.

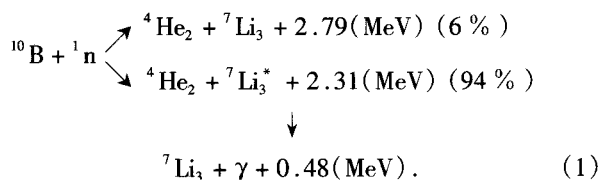
由于人脑结构的复杂性, 蒙特卡洛方法是 BNCT 最为可行的模拟工具, 但 MC 模拟要达到要求的精度, 计算十分耗时. 目前, 国际上推出的 BNCT 基准

模型计算, 网格分别采用 16mm, 8mm 和 4mm. 4mm 可以达到空间精度要求, 但计算时间太长. 本文结合 3 种模型各自的特点, 采用了粗细网格相结合的方法, 以 MCNP-4b^[2] 程序为模拟工具, 计算表明, 它完全达到了 4mm 的精度, 但计算时间仅为其 37%.

2 剂量计算

在 BNCT 治疗中, 绝大多数剂量来自 4 个部分: 1) 硼剂量; 2) 热中子剂量; 3) 快中子剂量; 4) 光子剂量. 除光子外, 其余反应的能量都是就地沉积, 光子则通过多次康普顿散射与光电效应逐步沉积能量, 其中部分光子经碰撞后可能会逃逸出系统, 带走部分能量, 有的甚至未经任何碰撞而直接逃出系统^[3].

1) 硼剂量:



该反应以 94% 的概率释放次级光子. 尽管硼在大脑中的浓度很小, 但由于硼对热中子的吸收截面非常大 (3840 barn), 释放能量多, 因而硼剂量对总剂量的贡献很大^[3].

2) 热中子剂量: 热中子(能量在 0.5eV 以下)剂量 96% 来自 $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$ 热中子俘获反应。

3) 快中子剂量: 主要由弹性散射沉积的中子能量。能量在 600eV 到 3MeV 之间的快中子剂量 90% 是同氢核反应的, $^1\text{H}(n, n)^1\text{H}$, 其他的反应比如和 ^{12}C , ^{31}P , ^{16}O 的反应占总快中子剂量的 4%—8%^[4]。需要指出, 快中子剂量统计的是除热中子外所有中子由于弹性散射而沉积的能量。

4) 光子剂量: 光子剂量由两部分组成, 一是伴随光子, 在入射的中子束中总是不可避免地会有伴随光子存在; 二是次级光子, 主要是由氢俘获光子反应 $^1\text{H}(n, \gamma)^2\text{H}$ 产生的, 还有部分是由硼中子俘获反应产生的。

目前对 BNCT 的计算, 普遍引用 ICRU44^[5] 报告提供的脑组织材料, ICRU63^[6] 报告提供的 Kerma 因子。但由于 ICRU63 报告只给出了能量在 0.0253eV 以上的中子 Kerma 因子, 而 0.0253eV 只是对应的常温下 Maxwell-Boltzmann 分布最可几值, 同时对热中子剂量贡献最大的氮的吸收截面是满足 $1/v$ 律的, 能量低于 0.0253eV 的中子对热中子剂量的贡献很大, 所以必须对能量在 0.0253eV 以下的中子进行处理, 比较合理的做法就是对能量低于 1eV 的中子进行双对数插值^[4]。

入射中子束使用宽谱超热中子束, 其中 1% 为快中子(10keV 到 2MeV), 10% 为热中子(1meV 到 0.5eV), 其余为超热中子。在 3 个能量区间中, 能谱均为 $\frac{1}{E}$ 分布。入射中子在半径为 5cm 的面源内均匀抽样, 源强为 $10^{10} \text{ n/cm}^2 \cdot \text{s}$ 。为减少在离入射面较远处的快中子剂量统计不确定性, 采用源能量偏倚抽样, 使得较多的抽到高能部分。

计算每个网格内的平均剂量, 近似认为就是网格内各点的剂量, 因此网格划分越密, 精度就越高, 但是网格尺寸每减少一半, 网格总数就增加 7 倍, 这给蒙特卡洛模拟带来了很大困难, 如何对网格进行合理的划分, 辅以相应的降低方差技巧, 使其既能保障计算精度, 又能节约计算时间, 成为本研究的核心。

3 计算方法

3.1 解析椭球模型

目前, 作理论计算普遍采用的头部模型是 Sny-

der 椭球模型。最初的 Snyder 模型是由两个椭球组成, 将头分为大脑和颅骨两部分, 修正模型再追加了一层 5mm 厚的皮肤层。大脑在 z 方向有 1cm 偏心。整个空间被分为 4 部分: 大脑, 颅骨, 皮肤, 空气(图 1)。各分界面由下面 3 个椭球方程决定。脑组织材料取自 ICRU44 报告, 见表 1^[5]。

$$\left(\frac{x}{6}\right)^2 + \left(\frac{y}{9}\right)^2 + \left(\frac{z-1}{6.5}\right)^2 = 1, \quad (2)$$

$$\left(\frac{x}{6.8}\right)^2 + \left(\frac{y}{9.8}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.3}\right)^2 = 1, \quad (3)$$

$$\left(\frac{x}{7.3}\right)^2 + \left(\frac{y}{10.3}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.8}\right)^2 = 1. \quad (4)$$

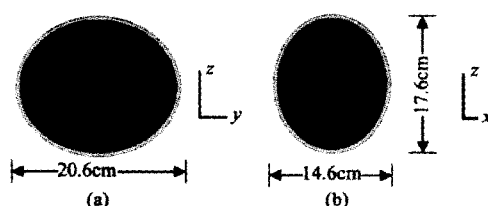


图 1 椭球头部模型剖面图

(a) $x=0$ 剖面图; (b) $y=0$ 剖面图。

表 1 脑组织的成分

原子序数	元素	空气	颅骨	大脑	皮肤
$\rho/(g/cm^3)$		0.001293	1.61	1.04	1.09
1	H	0	5.6	10.7	10
6	C	0.01	21.2	14.5	20.4
7	N	75.53	4	2.2	4.2
8	O	23.18	43.5	71.2	64.5
11	Na	0	0.1	0.2	0.2
12	Mg	0	0.2	0	0
15	P	0	8.1	0.4	0.1
16	S	0	0.3	0.2	0.2
17	Cl	0	0	0.3	0.3
19	K	0	0	0.3	0.1
20	Ca	1.28	17.6	0	0

3.2 体素网格化模型

在临床计算中, 目前普遍的做法是用材料模块来堆砌大脑结构, 在一个大得足够包容大脑的长方体中, 根据医学 CT 影像中各点的灰度来决定该点的组织特性, 然后用一个小立方体模型(比如边长为 8mm)来填充在长方体内相应的点附近区域, 模块内的材料和 CT 中对应点材料相同或近似, 每个模块中的材料都是 4 种基本材料: 大脑, 颅骨, 头皮, 空气的组合。并对 4 种基本材料量子化^[7], 每种基本材料在混合物中所占体积份额必须是 10% 的倍数,

比如,某一模块的材料可由 20% 的空气,80% 的头皮组成. 模块尺寸通常的取法有 4mm, 8mm, 16mm (见图 2).

在理论研究的过程中,解析模型被认为是精确描述大脑的标准模型,网格化模型是对解析模型的逼近,网格尺寸越小,越接近解析模型. 解析模型是不实际的,但它能为我们探索普遍规律提供方便,网格化模型是相对粗糙的,但在临床计算中,它能很好的逼近实际头部模型,临床计算中均采用这种网格化逼近的方法.

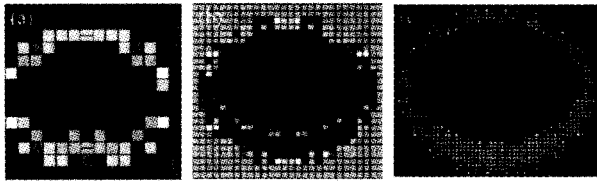


图 2 不同网格尺寸的体素模型比较
均为 $x=0(y-z)$ 剖面

在图 2 中,(a) 为 16mm 模型,共有网格数为 2360 个,(b) 为 8mm 模型,共有网格数为 16019,(c) 为 4mm 模型,共有网格数为 94392 个.

4 结果与讨论

4.1 单一尺寸网格模型

由于硼剂量的计算涉及到肿瘤的位置和硼浓度的分布,这与具体的情况有关,硼剂量几乎全部来自于热中子反应,只要能够得到正确的热中子通量计数,乘以相应的 Kerma 因子,硼剂量率以下所给出的均为剂量率(Gy/min)就随之得出,在此不打算给出硼剂量率.

用超热中子从 z 方向分别照射解析模型,16mm 模型,8mm 模型,4mm 模型. 对前 3 种模型均跟踪了 5 千万个源中子,由于 4mm 模型计算十分耗时,但计算精度高,对 4mm 只跟踪了 2 千万个源中子,计算资源见表 2. 热中子,快中子,光子剂量率如图 3 至图 8 所示.

从图 3 可见,对于热中子剂量率,在离表面 8cm 处,剂量率开始趋向于零. 4 条曲线在 4cm 以后吻合得很好. 计算表明,82% 的剂量率集中在前 6cm,因而,比较的重心应该集中在前 6cm. 从图 4 可见,4mm 模型的相对误差绝对值绝大多数都小于 2%,同解析模型结果符合得很好,8mm 模型同 4mm 模型

相比,只在前 4cm 稍差,其相对误差绝对值也都在 4% 以内,4mm 和 8mm 模型都是可以接受的. 而 16mm 模型的误差太大,因而不可取.

表 2 入射中子为超热中子束,所需内存与计算时间

模型	栅元数	所需最小内存/Mb	计算时间/h
解析		7.2	8.2
16mm	2360	13.9	9.35
8mm	16019	44.1	16
4mm	94392	272.7	23.8

注:计算机为奔腾 IV 2.4GHz 处理器,内存为 512M.

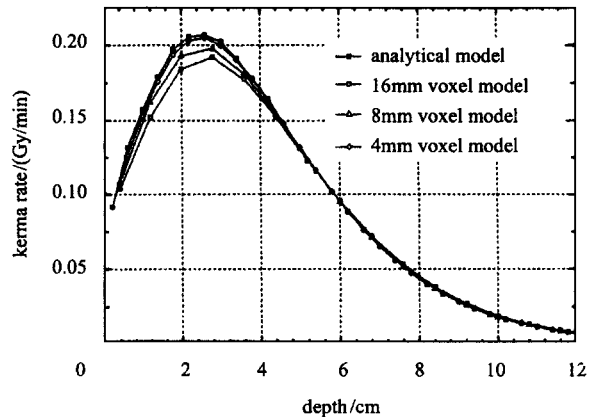


图 3 热中子剂量率沿 z 轴深度分布

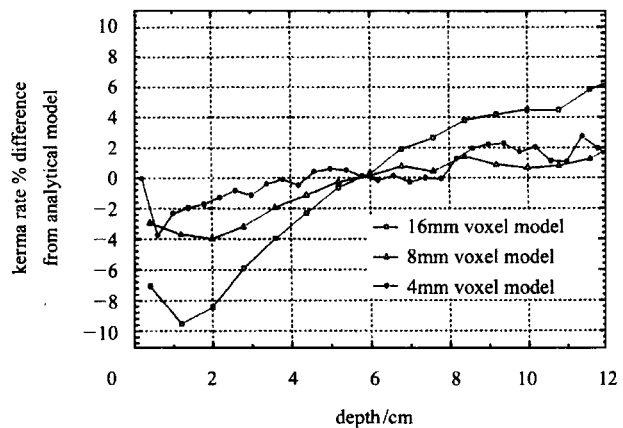


图 4 热中子剂量率相对误差

从图 5、图 6 可以看出,对于快中子剂量率,4mm 和 8mm 模型都能很好的近似解析模型.

由图 7、图 8 可见,光子剂量率同热中子剂量率具有相似的性质,4mm 模型的误差绝大多数小于 3%,而 8mm 模型则小于 5%. 同样 16mm 模型的误差太大,不可取.

虽然 4mm 模型的精度比 8mm 模型稍高一些,但

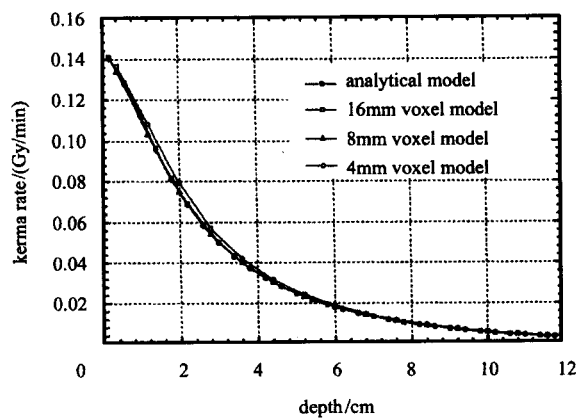
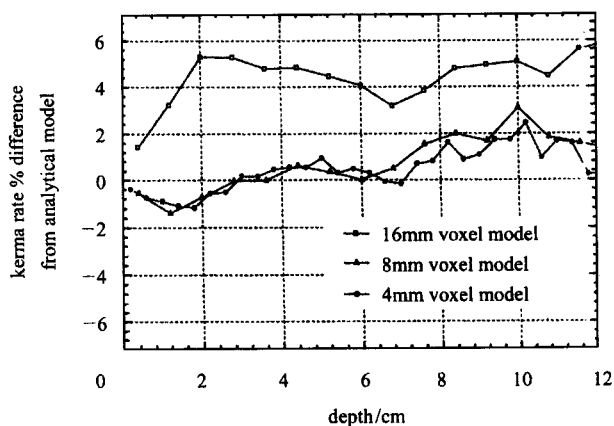
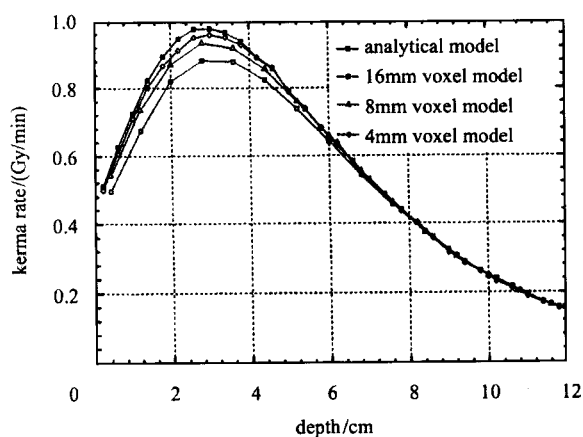
图 5 快中子剂量率沿 z 轴深度分布

图 6 快中子剂量率的相对误差

图 7 光子剂量率沿 z 轴深度分布

4mm 所耗费的计算资源远比 8mm 大, 性价比太低. 16mm 模型达不到精度要求.

由于各种剂量率主要集中在距离中子入射方向表面前 6cm 以内, 6cm 以后的重要性降低, 即使其计数误差较大一些, 由于其计数值接近于零, 对治疗的

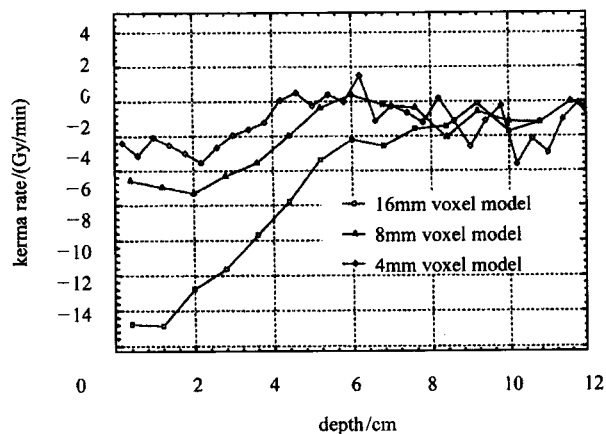
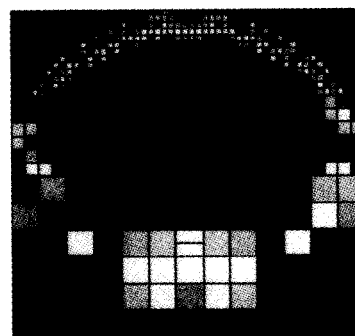


图 8 光子剂量率的相对误差

影响也很小. 同时各种模型在距离表面 6cm 以后都能较好的吻合, 因此, 可以预见, 将 6cm 以后的细网格模型用粗网格模型替代, 不会降低精度, 但可以大量节省资源.

4.2 混合网格模型

混合网格模型由 4mm, 8mm, 16mm 网格混合组成, 在比较了几种混合网格模型后, 使用图 9 所示的混合网格模型很好地结合了精度和计算时间的优点, 前 4.8cm 由 4mm 网格组成, 中间的 4.8cm 由 8mm 网格组成, 剩下的部分由 16mm 组成. 共有网格数约为 31300 个.

图 9 混合网格模型, x - z 剖面

在相同入射中子源照射的情况下, 相应的剂量率如图 10—图 13 所示. 对于快中子剂量率, 由于 4mm 和 8mm 模型都能很好的近似解析模型, 为精简起见, 未给出快中子剂量率图.

采用混合网格模型后, 模型网格数仅为原 4mm 模型的三分之一, 同样计算 2 千万个源中子, 所需时间为 9h, 为 4mm 模型 37%. 从图中可以看出, 同 4mm 模型相比, 使用混合网格后不会降低计算精

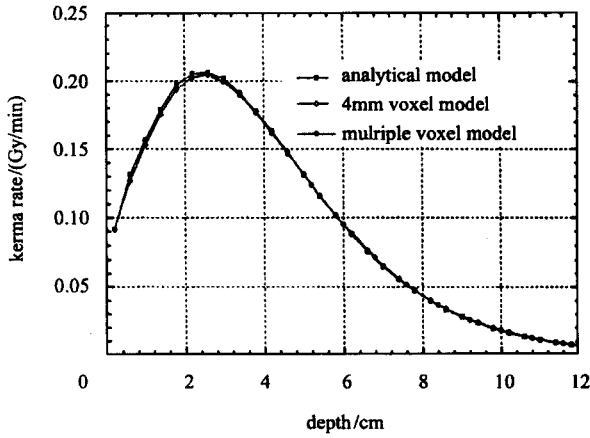


图 10 热中子剂量率沿 z 轴深度分布

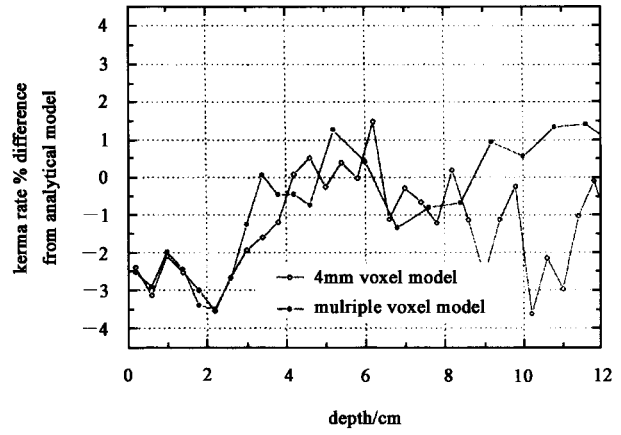


图 13 光子剂量率相对误差

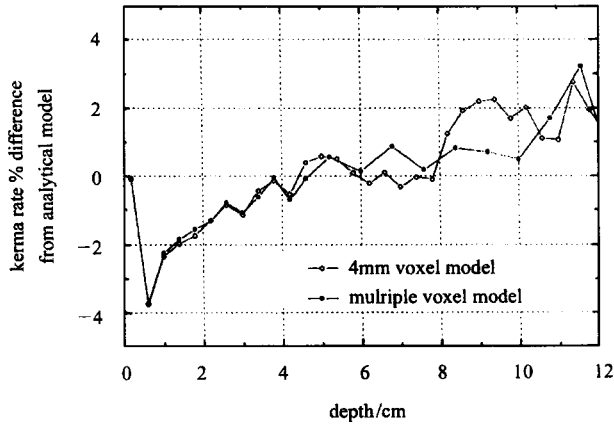


图 11 热中子剂量率相对误差

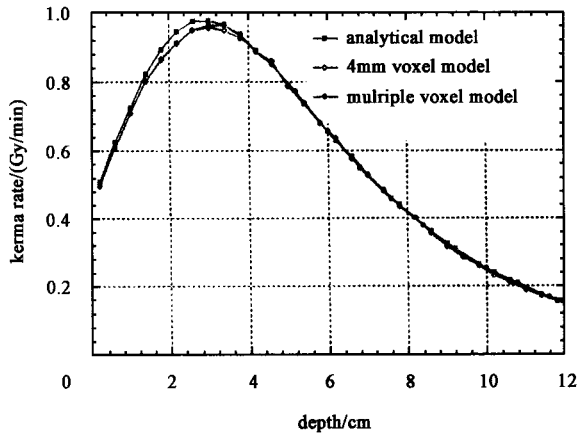


图 12 光子剂量率沿 z 轴深度分布

度,而计算资源可以大量节省.

5 结论

用体素网格模型来近似解析模型,在网格尺寸较小时,能取得很好的精度,目前在 BNCT 临床计算中被普遍采用. 从 8mm 减至 4mm,计算精度虽然提高,但计算资源数倍增长,继续减小网格尺寸并不能显著地提高精度.

使用混合网格,在重要的区域保留了 4mm 模型的精细处理,在计数率比重小的区域作了合并网格的处理,既能保证计算精度,还能大量节省计算资源. 在大网格的地方,由于计数率大,方差小,收敛加快,使 BNCT 在临床计算中更加切实可行.

通过对 4mm, 8mm, 16mm 网格以不同方式组合模型的计算,可以看出距入射中子方向的模型表面前 4.8cm 的部分使用 4mm 网格是合适的,在后面的部分,使用 8mm 多一些,还是 16mm 多一些对计算的影响不大.

未来的工作的方向将是如何实现在实际应用中的网格自适应划分,给出判据,同时,将 MCNP 的并行版本应用到 BNCT 上来,力求进一步减少时间.

参考文献 (References)

- 1 Rorer D et al. Current Status of neutron capture therapy, IAEA, 2001
- 2 Briesmeister J F (Editor). MCNP-A General Monte Carlo Code for N-Particle Transport Code, LA-12625-M, March, 1997
- 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 Goorley J T et al. Medical Physics, 2002, 29:145—156
- 5 ICRU44. International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, 1992, MD
- 6 ICRU63. International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, 2000, MD
- 7 Zamenhof R, Redmond E, Solares G et al. Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys., 1996, 35(2):383—397

Mix Mesh Sizes Arithmetic Research of BNCT Dose Rate Calculations by Monte Carlo Method

QIU You-Heng^{1,1)} DENG Li² YING Yang-Jun²

1 (Graduate School of China Academe of Engineer Physics, Beijing 100088, China)

2 (Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract Single mesh size phantoms are usually used in the calculations of BNCT dose rate by Monte Carlo method, such as 4mm, 8mm, 16mm. The result with 16mm mesh size model simulations produce unacceptable accuracies. Although the 4mm model simulation has a good precision, it costs lots of memories and computation time. The mixed mesh size model has the same precision as 4mm model, but its computation time is only 37 % of that.

Key words Monte Carlo simulation, absorbed dose rate, Boron neutron capture therapy (BNCT)