

MCDB 蒙特卡罗剂量计算系统及应用

邓力, 李刚, 陈朝斌, 叶涛

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

[摘要] 硼中子俘获治疗(BNCT)蒙特卡罗剂量计算软件系统 MCDB (Monte Carlo dosimetry code for brain) 已经开发成功。它包括医学前处理、剂量计算和后处理。前处理把 CT、MRI 图像数据自动转化为剂量计算的输入文件, 剂量计算基于蒙特卡罗(MC)方法, 后处理是确定照射方向和照射时间。为了提高剂量计算的精度和缩短计算时间, MCDB 发展了针对体素模型的快速粒子径迹算法, 构造材料矩阵和计数矩阵, 程序实现了 MPI 并行化。通过一个病例, MCDB 完成了从 CT、MRI 提取数据、剂量计算和后处理的全过程。计算取得了与 MCNP 程序一致的结果, 串行计算速度较 MCNP 提高 3 倍以上, 并行效率可以达到 90%, 完全满足临床对计算精度和计算时间的要求。

[关键词] MCDB; 快速径迹算法; 材料矩阵; 计数矩阵

[中图分类号] TP393 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1009-1742(2012)08-0072-06

1 前言

中子俘获治疗(neutron capture therapy, NCT)是在细胞层次上将具有高传能线密度(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。早在 1932 年 Chadwick 发现中子和 Goldhaber 于 1934 年发现了具有超常热中子吸收截面(3 840 Barn)的天然同位素硼(^{10}B)之后不久, 人们便提出了 NCT 的概念。 ^{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 α 粒子(^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 BNCT 的物理基础^[1]。Gordon Locher 于 1936 年首先提出了 BNCT 的原理。假定硼可有选择性地富集于肿瘤区, 由于硼具有超常的热中子吸收截面, 硼俘获热中子反应主要发生在肿瘤区, 反应后的能量在约 10 μm 内沉积, 因而, 被热中子照射后, 肿瘤区吸收的剂量就远比正常组织高, 就可以达到杀死癌细胞, 保护正常细胞的目的。因此, 从理论上讲, 如果能找

到理想的含硼药物, 注入人体后使硼在肿瘤区的浓度比正常组织高 3 倍以上(目前的 BPA 已能满足此要求), 治疗效果就会很好。

BNCT 用于临床治疗的历史已有 20 年, 主要优点是: a. 当前的硼化合物是无毒的, 且投放肿瘤区和正常组织的硼浓度富集度差可以做到最大化, 使得中子与硼作用产生的高能量、短射程的 α 离子在杀死肿瘤细胞的同时, 对正常组织的伤害达到最小; b. 中子束技术日趋先进, 可以来自加速器, 也可来自微型反应堆; c. 中子束强度可控, 既可发出超热中子束, 也可发出热中子束, 根据肿瘤深度, 确定中子束类型; d. BNCT 适合治疗不宜手术的晚期癌症患者, 且治疗的肿瘤类型由脑胶质瘤, 向其他包括肝癌、肺癌、皮肤癌等发展; e. BNCT 的最大好处还在于, 它给患者带来的治疗副作用少, 没有放疗、化疗那样的不适反应; f. BNCT 治疗后的病人存活期通常要长于其他治疗方法, 且成本不高。因此 BNCT 目前已成为肿瘤治疗的一个较好选择。

由于被治疗的病人总会带有一定的放射性, 这会给医护工作者带来一定的心理负担和健康危害。

[收稿日期] 2012-05-30

[基金项目] 中国工程物理研究院基金资助项目(2011A0103006); 国家磁约束核聚变能研究专项资助(2010GB111001)

[作者简介] 邓力(1960—), 男, 四川绵竹市人, 博士, 研究员, 主要从事粒子输运方法及应用研究工作; E-mail: deng_li@iapcm.ac.cn

另外,在拥有众多人口的医院内建医用反应堆治疗室,在许多国家获得批准的可能性较小,这也多少妨碍了 BNCT 的推广应用。我国 BNCT 起步较晚,但发展速度很快,在周永茂院士和王忠诚院士的推动下,这项工作已取得实质进展。经过不懈努力,30 kW 的微型医用反应堆于 2010 年在房山中国原子能科学研究院建成,目前正在临床前的动物实验。

世界上开展 BNCT 研究的国家有 20 多个,美、日、欧、阿根廷等国家和地区代表世界最高水平。然而,用于临床治疗的剂量计算软件目前只有 6 个,它们是 NCTPlan、MacNCTPlan^[2]、BNCT - rtpe^[3]、SERA^[3]、JCDS^[4] 和笔者研究团队研制的 MCDB^[5]。MCDB 尚需临床应用的检验,目前只做了一些比对计算和效率测试。

2 MCDB 核心算法介绍

MCDB 的前、后处理是完全自主开发的,中间剂量计算涉及中子 - 光子耦合输运问题,这部分是在引进蒙特卡罗程序 MCNP4C^[6] 基础上开发研制的。由于 MCNP 程序是个通用程序,直接用于剂量计算,一来原程序没有剂量计算所需的响应截面库(Kerma 因子),二来计算效率较低,无法满足临床对计算精度和计算时间的要求,三来 BNCT 的网格数巨大,已超过 MCNP 的最大几何块 10^6 限制。临床计算要求每个体素(voxel)网格剂量的统计误差 $\leq 5\%$,计算时间不超过 2 h,这对 MCNP 串行计算

来说是做不到的。因此,需要对程序做多方改进。

当前 MCDB 相对 MCNP 的主要改进包括:a. 增加了前处理,即体素(voxel)模型的构造,把 CT 和 MRI 数据自动转化为 MCNP 的输入文件;b. 突破了 MCNP 程序对几何块、几何面及计数的限制,根据计算机内存,可以动态调整这些参数;c. 针对特殊体素网格模型,发展了一套快速粒子径迹算法;d. 计数矩阵和材料矩阵构造,克服了 MCNP 程序初始化时间随网格数增加呈指数增长的不足;e. MPI 并行计算。

下面给出剂量计算的步骤,总剂量 D 由硼、 γ 、中子、质子四部分剂量组合而成,可表示为:

$$D = W_c D_B + W_\gamma D_\gamma + W_n D_n + W_p D_p \quad (1)$$

式中: W_c 为硼剂量的复合生物效应值; W_γ 、 W_n 、 W_p 分别为光子、快中子、质子(氮俘获)剂量的相对生物效应值。

输运计算涉及中子 - 光子耦合输运,剂量通过通量和 Kerma 因子响应得到:

$$dose(j) = \int \phi(j, E) \cdot Kerma(j, E) dE / V(j) \quad (2)$$

这里 $Kerma(j, E)$ 为第 j 个体素网格、能量为 E 的通量剂量转换因子,数据来自 ICRU - 632000^[7]; $\phi(j, E)$ 为第 j 个体素网格、能量为 E 的通量; $V(j)$ 为第 j 个体素网格的体积。

由于 BNCT 复杂的几何和对方向、能量的精度要求很高,因此,通常用 MC 方法进行模拟,MC 计算通量的公式如下:

$$\begin{cases} \phi(j, E) \approx \frac{S_0}{N} \sum_{n=1}^N \sum_m w_m^{(n)}(j, E) d_m^{(n)}(j) \\ w_m^{(n)}(j, E) = w_{m-1}^{(n)}(j, E) [1 - \Sigma_a^{(m-1)}(j, E) / \Sigma_t^{(m-1)}(j, E)] \end{cases} \quad (3)$$

式中: S_0 为源强; N 为模拟的样本数(粒子数); w_m 为第 m 次碰撞的粒子权重(初值 $w_0 = 1$); d_m 为粒子在第 j 个网格走过的径迹长度; $\Sigma_a^{(m-1)}$ 、 $\Sigma_t^{(m-1)}$ 分别为粒子的宏观吸收和总截面^[7]。

对 d_m 的计算,涉及粒子飞行线与被穿过几何块交点的计算,由于 MC 输运计算时间的 70% 花在处理碰撞和粒子径迹的计算上,缩短计算时间的关键就是要缩短计算径迹的时间。针对体素模型单一结构网格的特点,发展快速计算径迹 d_m 的算法是完全可能的。

2.1 体素模型的构造

如图 1 所示,在 Goorley 的文章中,介绍了

Snyder 简化头模型^[8],该模型包括头皮、颅骨和大脑三部分。体素模型将基于头的大小,确定 x 、 y 、 z 方向的范围,形成一个能正好罩住头部的盒子,其定义域为 $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}]$ 。在每个方向分别确定网格数目,假定 x 、 y 、 z 方向的网格数分别为 M 、 N 、 L ,则总网格数为 $M \times N \times L$,每个网格大小相同,为一长方体。根据 CT 灰度值确定每个网格的材料成分。困难在两种物质交界面的处理,它含有两种以上的物质,混合后形成新的物质,解析模型只有 4 种基本物质(见图 1(a)),转换为体素模型后,新增了 282 种物质,总物质数达到 286 种(见图 1(b))。

这里重点介绍 MCDB 的两种算法。

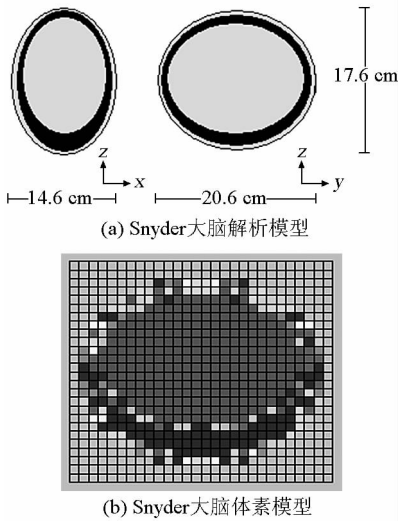


图1 Snyder 基准模型

Fig.1 Snyder benchmark model

2.2 中心点方法

为了节约内存,降低模拟问题的复杂度,用每个网格中心点的材料作为整个网格的材料。这种处理只有在质量守恒前提下有效。经验证,当体素网格边长小于 5 mm 时,就是在最薄的皮肤层质量误差也小于 1%,满足守恒要求。由于中心点方法不增加材料数目,因而可以节约大量内存,串行对计算时间影响不大^[9],但对并行计算来说,通讯量的减少意味着并行加速比的提高。

2.3 快速粒子径迹算法

基于整数的运算速度最快,每个网格被映射到单位立方体网格,在单位立方体网格下,每个网格节

点均可用整数 (i, j, k) 表示,网格定义域可表示为: $[i-1, i) \times [j-1, j) \times [k-1, k)$, 它的相邻 6 个网格分别为 $(i \pm 1, j, k)$, $(i, j \pm 1, k)$, $(i, j, k \pm 1)$ 。建立一个与网格对应的三维材料矩阵和计数矩阵。对所有网格进行计数。由于采用半开半闭的区间表示,每个粒子的属性是唯一的,因此,不会出现 MCNP 那样的由于二异性导致的丢失粒子现象。由于粒子轨迹是在立方体网格中穿越的,粒子沿某个飞行方向穿过的几何块径迹不必按 MCNP 的模式计算,利用等差关系就可快速求出粒子沿飞行线穿过的多个网格的径迹。同时,到碰撞点的距离也不必在每个网格抽取,已抽取的距离可以一直用下去,直到碰撞发生。其后再重新抽取到达碰撞点的距离。详细算法可参考文献[6,10]。

3 有效性测试

3.1 剂量计算

MCDB 用 BNCT 基准模型的测试已经做过^[6,10],这里选择一个实例,笔者等从天坛医院得到一个病人的 CT 图(共 43 片,见图 2),首先用 MCDB 的前处理进行三维重构(见图 3(a)),然后生成体素模型(见图 3(b)),体素模型网格大小为两种: a. CT8 模型,每个网格由 8×8 像素组成,共分 $64(x \text{ 方向}) \times 64(y \text{ 方向}) \times 43(z \text{ 方向}) = 176\ 128$ 个网格,每个网格大小为: $0.370\ 3\ \text{mm} \times 0.370\ 3\ \text{mm} \times 0.3\ \text{mm}$; b. CT4 模型,每个网格由 4×4 像素组成,共分 $128(x \text{ 方向}) \times 128(y \text{ 方向}) \times 43(z \text{ 方向}) = 704\ 512$ 个网格,每个网格大小为: $0.185\ 2\ \text{mm} \times 0.3\ \text{mm} \times 0.3\ \text{mm}$ 。

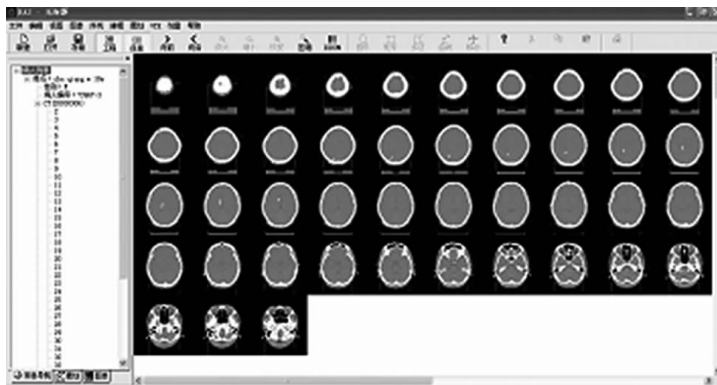
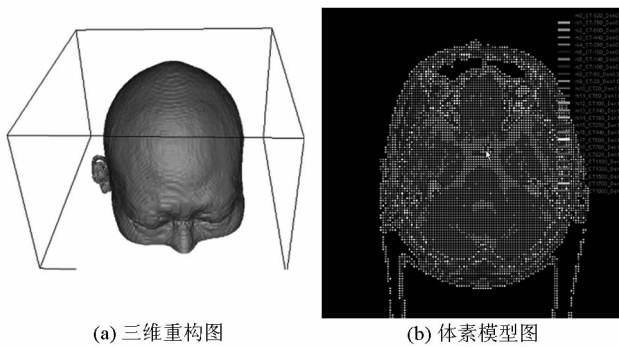


图2 CT 图

Fig.2 CT pictures



(a) 三维重构图

(b) 体素模型图

图3 MCDB 前处理示意图

Fig. 3 Sketch of MCDB pre - processor

入射中子束使用宽谱超热中子束,其中1%为快中子($E \geq 10$ keV),10%为热中子($E \leq 0.5$ eV),其余89%为超热中子(0.5 eV $\leq E \leq 10$ keV)。在3个能量区间中,能谱均为 $1/E$ 分布,入射中子均匀分布在半径5 cm的圆面上,源强为 10^{10} cm⁻² · s⁻¹,模拟1 000万粒子。为了确保热中子、快中子和 γ 剂量的同步收敛,采用源能量偏倚发射。图4给出MCDB和MCNP5热中子剂量、快中子剂量和 γ 剂量比较

(MCNP5的几何块、几何面仍受到 10^6 的限制,但mesh计数没有限制)。图5给出两者的数值差距的比较,由于数据量巨大,只好通过二维平面来表示,用 x_i 表示MCNP5剂量结果; y_i 表示MCDB剂量结果(剂量单位:Gy), i 表示网格号。若 $x = y$,则 (x, y) 正好在45°线上。最后表1给出两种体素模型下,MCNP5和MCDB串行计算时间的比较。图6分别给出中子、光子剂量面图。

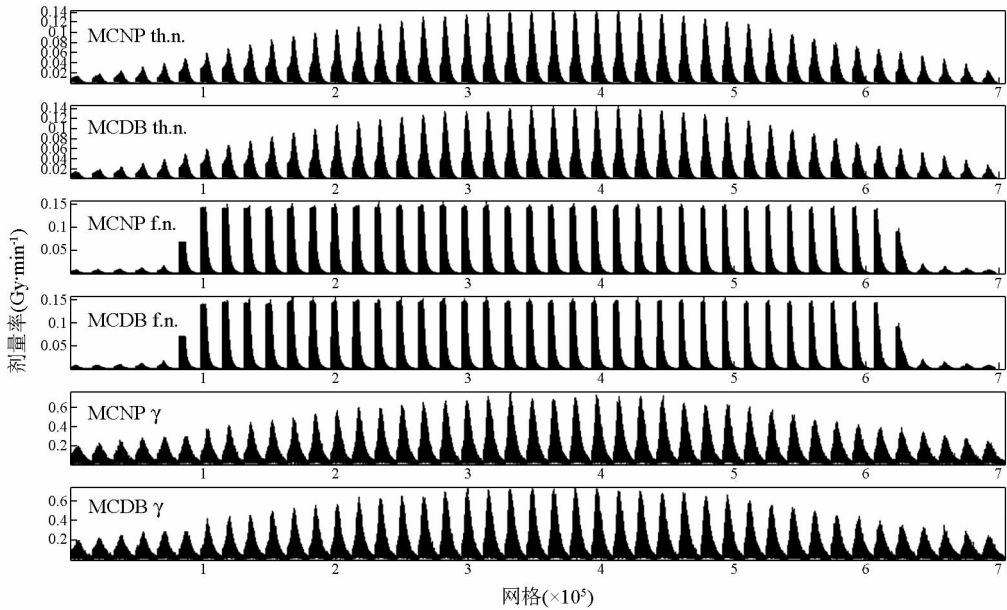


图4 MCDB和MCNP5热中子剂量、快中子剂量和 γ 剂量比较

Fig. 4 The dose comparison of MCDB and MCNP5 about thermal neutron, fast neutron and photon

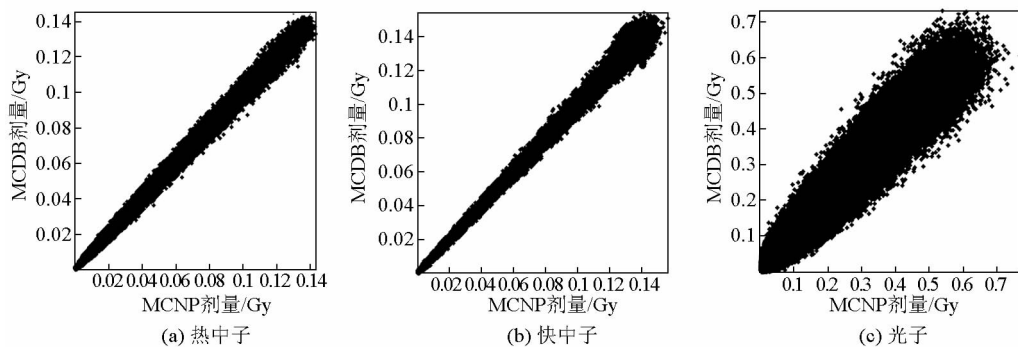


图5 MCDB 和 MCNP5 剂量计算结果偏差比较

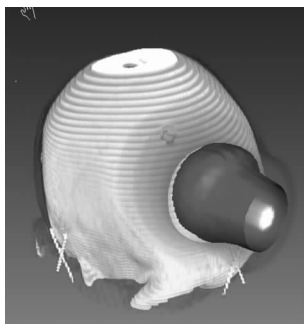
Fig. 5 Difference comparison between MCDB and MCNP5 doses

表1 MCDB 与 MCNP5 计算时间比较

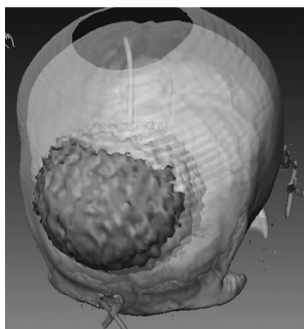
Table 1 Comparison of MCDB and MCNP5 in computational time

模型	网格数	几何描述	计数类型	程序	计算时间/min	加速比
CT8	176、128	重复结构	Mesh 计数	MCNP	185.26	3.07
		材料矩阵	计数矩阵	MCDB	60.34	
CT4	704、512	重复结构	Mesh 计数	MCNP	276.34	3.40
		材料矩阵	计数矩阵	MCDB	81.26	

注:计算机为 Pentium IV 3.0 GHz PC 机



(a) 中子剂量面



(b) 光子剂量面

图6 照射部位的确定

Fig. 6 Determination of irradiation location

3.2 结果分析

从图4给出的结果,通过肉眼很难看出 MCDB 和 MCNP 两者的差距,但从图5可以看出两个程序的计算结果差异还是存在的,特别是 γ 计数,由于其主要来自中子碰撞产生的次级光子,数目较少,因此统计误差较大,两个程序的计算结果都存在一定的不确定性。由于 MCNP 程序的权威性,它的计算结果通常被用来标定其他程序结果的正确性,因此可以初步肯定 MCDB 程序的计算结果是正确的。MCDB 还发展了组合网格模型及其相关网格下的快速粒子径迹算法,这些算法的有效正确性也得到了验证^[6]。

4 结语

通过一个实际模型全过程的模拟,验证了 MCDB 治疗计划软件的正确有效性。下一步 MCDB 将用于临床实际,根据遇到的问题,再做进一步的改进。

致谢 软件发展到今天,得到周永茂院士的精心指导,他提出了许多有益的建议。借此,向他表示深深地感谢!

参考文献

[1] Rore A, Wambersie G, Whitmore R. Current status of neutron capture therapy [R]. 2001, IAEA.

[2] González S, Santa Cruz J, Kiger III W, et al. NCTplan, the New PC version of MacNCTplan: improvements and verification of a BNCT treatment planning system [C]//Proceedings of the 10th International Congress on Neutron Capture Therapy for Cancer. 2002, Essen, Germany.

[3] Seppälä, Kankaanranta L, Serén T, et al. BNCT_RTPE and SERA dose planning programs: phantom and patient studies [C]//Program and abstracts of 9th International Symposium on

Neutron Capture Therapy for Cancer. ISNCT: Osaka, 2000, 175 - 176.

- [4] Kumada H, Yamamoto K, Matsumura A, et al. Verification of the computational dosimetry system in JAERI (JCDS) for boron neutron capture therapy [J]. Phys Med Biol, 2004, 49: 3353 - 3365.
- [5] Li Deng, Gang Li, Tao Ye, et al. MCDB Monte Carlo code with fast track technique and mesh tally matrix for BNCT [J]. J Nucl Sci Tech, 2007, 44: 1518 - 1525.
- [6] ICRU -63. Nuclear data for neutron and proton radiotherapy and for radiation protection, ICRU report No. 63 [R]. International

Commission on Radiation Units and Measurements, 2000, Bethesda, MD.

- [7] Briesmeister J F. MCNP - a general Monte Carlo code for n - particle transport code [R]. LA - 12625 - M, 1997.
- [8] Goorley J T, Kiger III W S, Zamenhof R G . Reference dosimetry calculations for neutron capture therapy with comparison of analytical and voxel models [J]. Med Phys, 2002, 29(2): 145 - 156.
- [9] Gang Li, Li Deng. Optimized voxel model construction and simulation research in BNCT [J]. HEP&NP, 2006, 30: 171 - 177.
- [10] 李 刚. BNCT 的蒙特卡罗模拟方法研究及软件研制[D]. 北京:中国工程物理研究院北京研究生部,2005.

MCDB Monte Carlo dosimetry code system and its applications

Deng Li, Li Gang, Chen Chaobin, Ye Tao

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

[**Abstract**] MCDB is developed for boron neutron capture therapy (BNCT). This system consists of a medical pre-processor, a dose computation and a post-processor. MCDB automatically produces the input file from CT and MRI image data. In Monte Carlo dose calculation, several accelerated measures, such as the fast track technique, mesh tally matrix and material matrix, are developed. In this paper, we proposed a real model simulated by MCNP and MCDB, respectively. The almost same results as MCNP are achieved. MCDB is faster in computational speed than MCNP.

[**Key words**] MCDB; fast tracking technique; mesh tally matrix; material matrix