

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ВЕЩЕСТВЕ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ И РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ. ПРИМЕНЕНИЕ К ЗАДАЧАМ АДРОННОЙ ТЕРАПИИ

С.П. Мерц

## Введение

Моделирование процессов распространения заряженных частиц и жесткого электромагнитного излучения в различных средах на основе использования реалистических полуэмпирических моделей представляет собой актуальную задачу. Его результаты могут использоваться для расчёта систем радиационной защиты, в ядерной физике и дозиметрии. Развитие ускорительной техники привело к использованию знаний в области ядерной физики и в медицинских целях, например, лечению злокачественных опухолей пучками высокоэнергетических заряженных частиц. Значительный интерес представляет использование пучков адронов, а также ядер некоторых элементов. Терапевтический эффект в данном случае основан на свойстве частиц, имеющих ненулевой заряд, резко тормозить в конце своего пробега и передавать большую часть своей энергии поглощающему веществу. Это свойство получило название «пик Брэгга», по имени ученого, предсказавшего это явление. Эффективное лечение требует тщательной предварительной подготовки, основанной на моделировании процессов в биологических тканях. При этом важен учёт химического состава ткани, физических свойств, реальной геометрии облучаемого органа.

Стандартным средством моделирования являются методы Монте-Карло. Они используются в целом ряде пакетов, предназначенных для моделирования взаимодействия различного рода частиц с веществом. Широкое применение нашли пакеты Fluka и Geant4 [1, 2]. Оба этих пакета являются свободно распространяемыми и работают в среде операционных систем Unix.

Пакет Fluka представляет собой набор подпрограмм, написанных на языке программирования Fortran77. Написание пользовательского приложения в этой программе представляет собой заполнение специальной таблицы, содержащей параметры вычислительного эксперимента.

Пакет Geant4 написан на языке программирования C++ с использованием объектно-ориентированного программирования. Написание пользовательского приложения в этом случае представляет собой последовательный вызов необходимых методов классов с различными параметрами.

С помощью пакетов Fluka и Geant4 у пользователя появляется возможность учесть различные процессы, геометрию моделируемой системы, частицы, участвующие во взаимодействиях и т.д. Вместе с тем время моделирования существенно зависит от параметров эксперимента и может быть достаточно большим. Это значит, что актуальным в данном случае является применение технологий высокопроизводительных и распределённых (на основе использования грид-систем) вычислений.

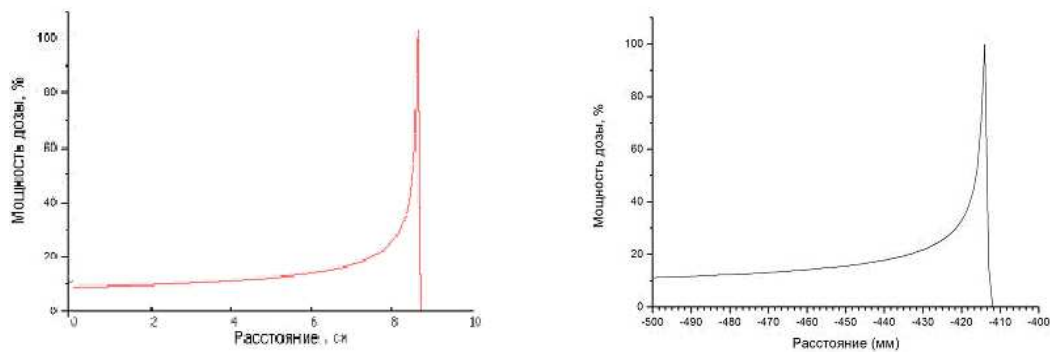


Рис. 1

В работе решались следующие задачи:

- Моделирование кривой Брэгга для пучков протонов и однократно ионизированных ионов углерода в воде при нормальных условиях.

Решены следующие подзадачи:

- получены зависимости длины пробега от энергии и сорта частиц;
- получены зависимости высоты пика Брэгга от энергии и сорта частиц;
- 2. Получение модифицированной кривой Брэгга.
- 3. Подбор параметров эксперимента для понижения энергии падающих на мишень протонов с 1 ГэВ до медицинских значений.

Построены также эмпирические модели производительности - зависимость времени моделирования от энергии и сорта частиц.

#### Результаты

На рис. 1 представлены примеры полученных кривых Брэгга для ионов углерода с энергией 2.4 ГэВ. Для сравнения даны результаты, полученные с помощью пакетов Geant4 и Fluka. Сравнение результатов моделирования в разных программах, а также сравнение с реальными экспериментами является важной задачей, которую мы ставим перед собой.

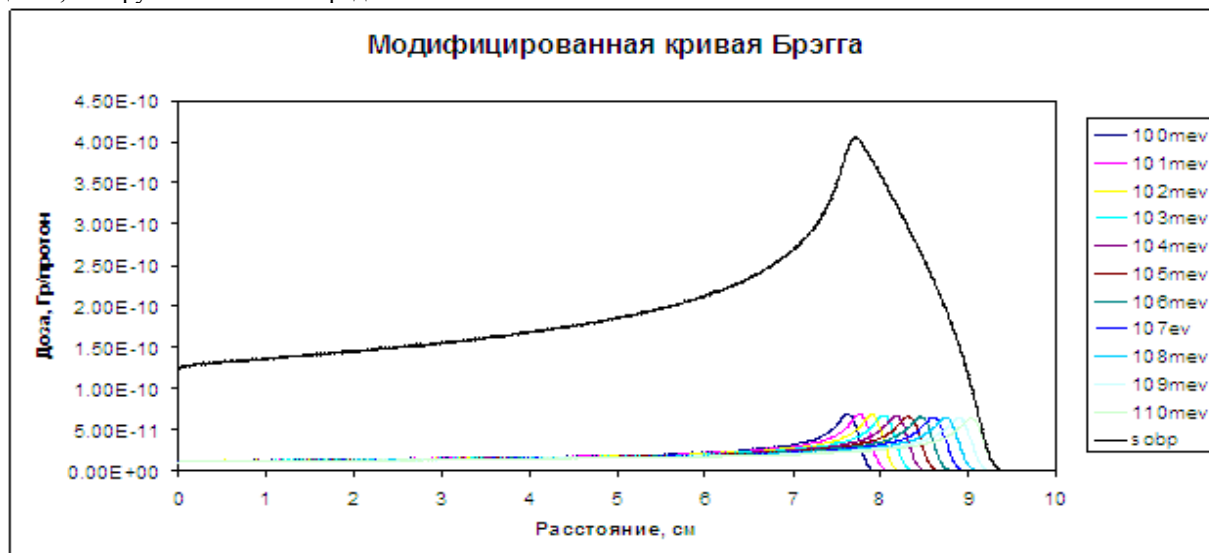


Рис. 2

Так как при реальном лечении опухоль имеет не точечную структуру, а протяжённую, то ее необходимо просканировать. То есть облучить протяжённый участок, изменяя энергию с мелким шагом. График суммарной дозы, которую получают клетки при таком сканировании называется модифицированной кривой Брэгга (Spread Out Bragg Peak). На рис. 2 представлены кривые Брэгга для протонов в диапазоне энергий от 100 до 110 МэВ, с шагом по энергии 1 МэВ, а также модифицированная кривая Брэгга. Видно, что суммарная доза имеет явный пик. Оптимальным является случай, когда пик Брэгга представляет собой плато с размером, равным длине опухоли. Это необходимо для того, чтобы все клетки опухоли получили одинаковую дозу. Для получения плато необходимо суммировать дозы от отдельных пиков Брэгга с разными весами. Задача оптимизации заключается в расчете этих весов. Нужно отметить, что веса в математической постановке соответствуют числу запускаемых частиц при моделировании.[6] [[Рис.2]]

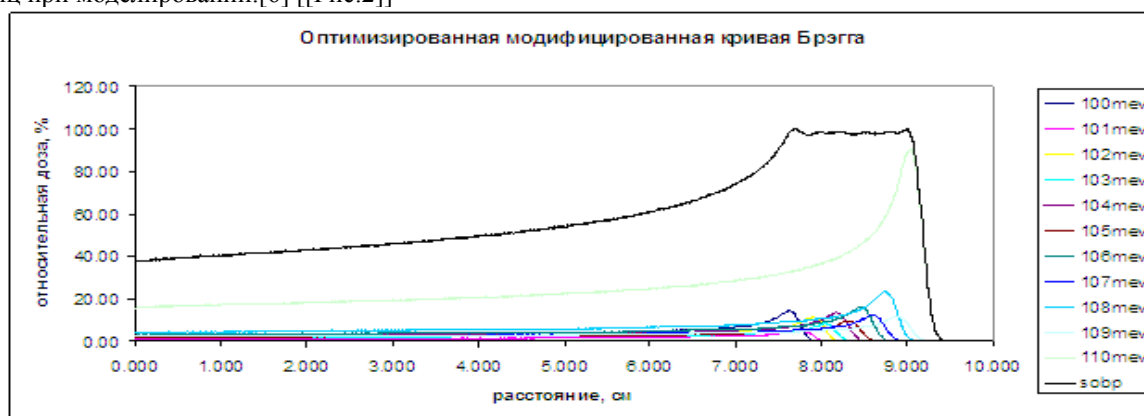


Рис. 3

На рис. 3 представлены графики «взвешенных» пиков Брэгга и суммарной дозы. [[Рис.3]]

#### Оптимизация вычислительного эксперимента

Моделирование в описываемой задаче – достаточно ресурсоёмкое, что можно видеть из временных зависимостей, представленных на рис. 4. Необходима оптимизация вычислений, в том числе и с использованием технологий высокопроизводительных вычислений.

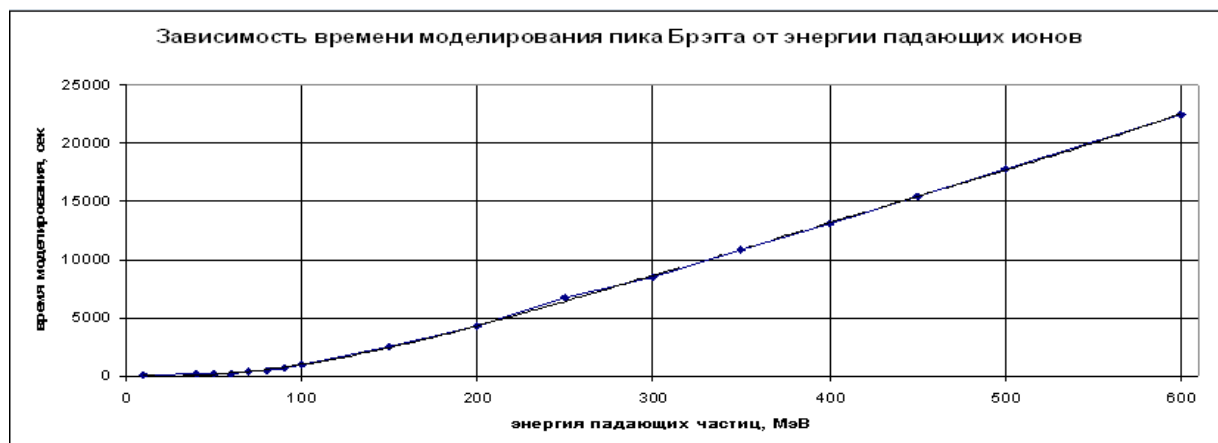


Рис. 4

Пакет ParGEANT [3], основан на использовании библиотеки TOP C [4] (Task Oriented Parallel C/C++) и предназначен для работы на параллельных вычислительных системах. В настоящее время ведется работа по написанию параллельной версии приложения и оценке эффективности применения ParGeant. На рис. 5 представлен график, характеризующий ускорение времени моделирования движения протона в воде.

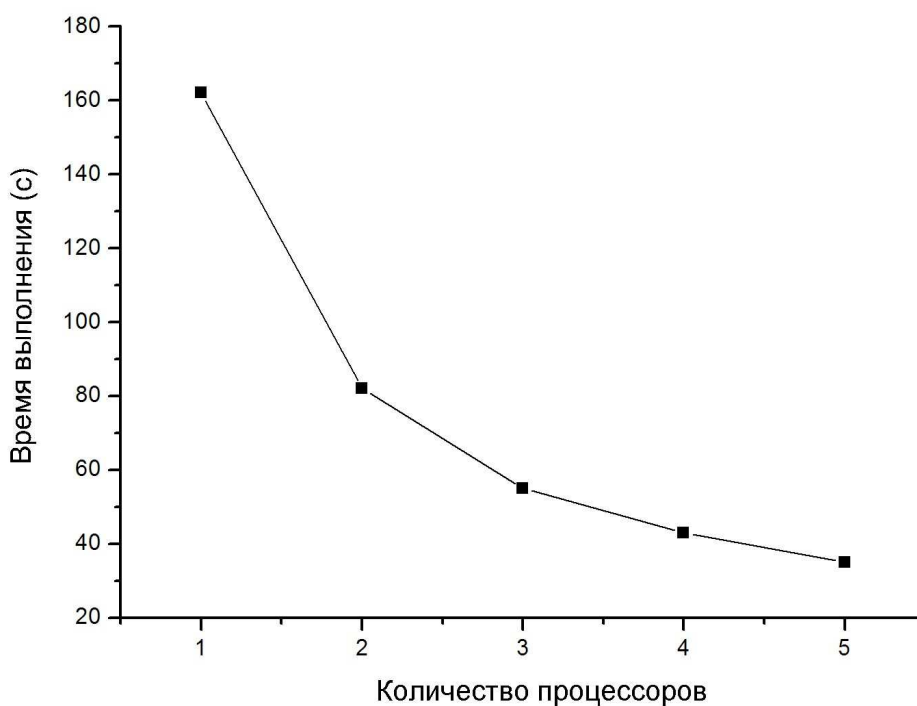


Рис. 5

Одной из важных областей для применения описанных выше пакетов моделирования является задача по моделированию прохождения частиц сверхбольших энергий в веществе. И подбор параметров для поглотителя. Задача эта связана с отсутствием в России специализированных ускорителей для получения частиц с энергиями пригодными для лечения. На сегодняшний день есть ряд центров с ускорителями, переоборудованными под лечение злокачественных опухолей "напролет", то есть когда ни о каком пике Брэгга речи не идет, а частицы пролетают через пациента насквозь. В связи с этим появилась задача построения такого поглотителя, который позволит понизить энергию частиц до медицинского уровня при этом сохранив форму пучка узконаправленной.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Официальный сайт пакета FLUKA – <http://www.fluka.org>.
2. Официальный сайт пакета GEANT4 – <http://geant4.cern.ch>.
3. Including Parallelism in Geant4 (Gene Cooperman, NU Boston, MA, USA).
4. Task Oriented Parallel C/C++ <http://www.ccs.neu.edu/home/gene/topc.html>.

5. Ананько С.С., Мерц С.П., Немнюгин С.А. Моделирование прохождения электромагнитного излучения через вещество с помощью пакета моделирования FLUKA // Тезисы докладов XVI всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках», Пермь, 2007, С. 62-63.
6. Ананько С.С., Кавригин П.С., Мерц С.П., Немнюгин С.А., Толушкин С.Г. Моделирование процессов распространения заряженных частиц и жесткого электромагнитного излучения с использованием технологий высокопроизводительных и распределенных вычислений //Журнал «Научно-технические ведомости СПбГПУ», Санкт-Петербург, 2009, (в печати).