

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ АДРОННОЙ ТЕРАПИИ

П.С. Кавригин, С.П. Мерц, С.А. Немнюгин

Одной из основных задач современной медицины является лечение онкологических заболеваний. В этой области существуют три основных методики: хирургия, химиотерапия и лучевая терапия. Последняя основана на использовании ионизирующего излучения для повреждения цепочек ДНК в раковых клетках. Для этой цели используют как жесткое электромагнитное излучение, так и пучки различных элементарных частиц.

Основными характеристиками используемого в терапии излучения являются профиль поглощенной дозы, определяющий точность локализации дозы в тканях, а также его биологическая эффективность. Использование гамма-лучей, с этой точки зрения, не является оптимальным решением; как было показано в работе [1], применение протонов и ионов легких элементов предпочтительнее благодаря эффекту "пика Брэгга": резкому увеличению ионизации вещества в конце траектории частицы. Очевидно, что характер профиля поглощенной дозы протонов и ионов углерода дают возможность чрезвычайно точно провести облучение области злокачественной опухоли, значительно уменьшив ионизацию окружающих здоровых тканей, по сравнению с гамма-лучами. Этот метод лучевой терапии активно развивается с середины 1950-х годов, его эффективность была подтверждена многочисленными клиническими испытаниями.

В этой области существует множество задач, решение которых требует использования вычислительных технологий - проектирование ускорителей частиц и оборудования центров, разработка методов планирования лечения, моделирование радиобиологических эффектов от применения излучения и т. д. Для работы над этими задачами требуются как вычислительные ресурсы, так и соответствующие программные средства. Среди таких средств широко применяются программные пакеты Geant4 и FLUKA. Эти пакеты используют методы Монте-Карло для моделирования взаимодействия частиц с веществом [2-3]. Geant4 - библиотека классов C++, предоставляющая возможность детального описания геометрии, химического состава и физических характеристик моделируемой системы, а также подключения описания всех необходимых физических процессов. Этот пакет разработан в институте CERN и является свободно распространяемым. FLUKA также распространяется свободно, разработчики - институты CERN и INFN.

Построение кривой энергетических потерь частиц

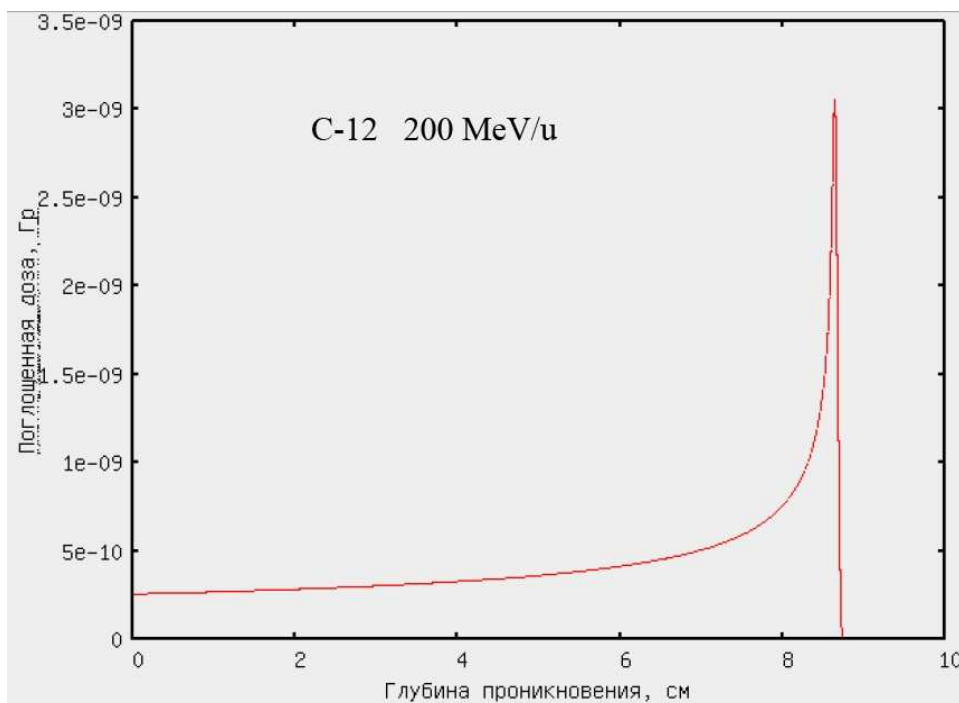


Рис. 1

Построение кривой энергетических потерь частиц, проходящих через вещество или же поглощенной дозы в веществе, важно для сравнения данных, полученных в ходе моделирования, с данными реальных экспериментов (т.е. верификации результатов работы приложения) и оценки локализации дозы при работе с разными частицами, учета физических процессов, сопровождающих распространение пучка частиц в веществе. Моделирование проводилось для протонов и ионов углерода при их поглощении в воде. Были получены

зависимости, согласующиеся с доступными опытными данными. На рис. 1, 2 представлены графики поглощенной дозы для иона углерода с начальной энергией 200 МэВ/нуклон, полученные при помощи пакетов FLUKA и Geant4 соответственно.

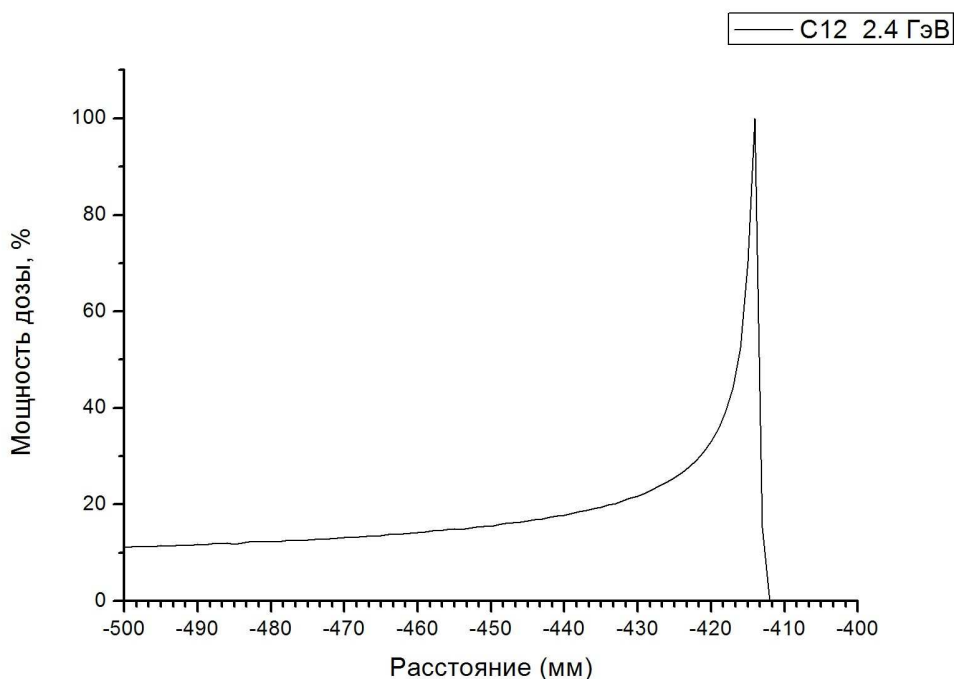


Рис. 2

Построение модифицированной кривой Брэгга

Облучаемая опухоль является не точечным, а объемным объектом, что подразумевает определенные трудности в планировании сессии облучения. Если требуется получить набор пиков энергетических потерь на разной глубине в веществе, подбираются разные начальные энергии частиц, но это также дает различные значения максимума энергетического пика. Таким образом, для передачи одинаковой дозы во все точки злокачественного образования необходимо варьировать интенсивности для частиц различных начальных энергий.

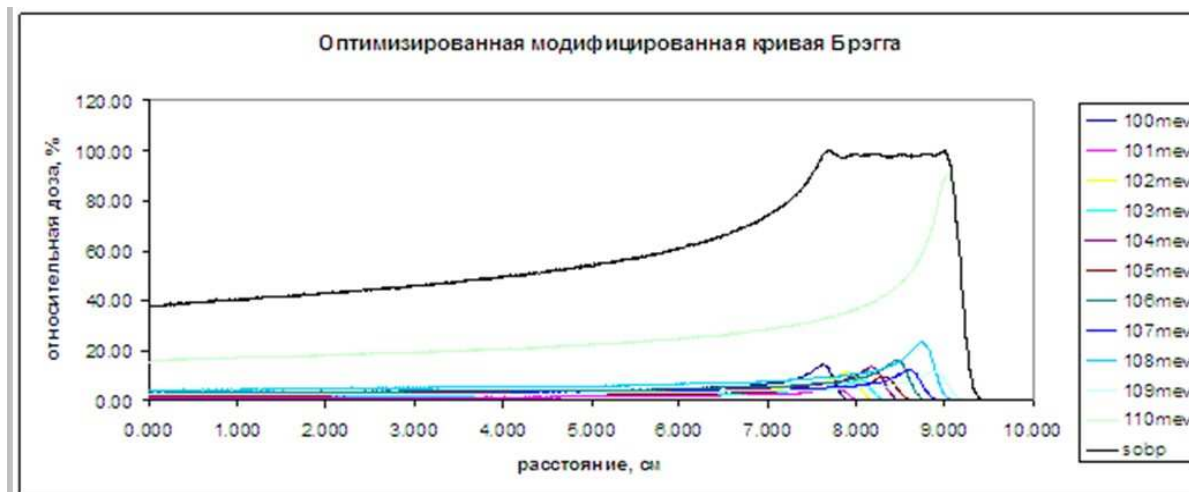


Рис. 3

На рис.3 представлена модифицированная кривая Брэгга для протонов с начальными энергиями 100-110 МэВ.

Понижение энергии пучка протонов

При использовании существующих ускорителей частиц часто возникает проблема получения пучка частиц <медицинских> энергий, при которых возможно получение пика Брэгга на нужной глубине в облучаемых тканях (60-240 МэВ для протонов, 110-450 МэВ/нуклон для ионов углерода). Если выходной пучок частиц имеет более высокую энергию, необходимо работать без использования эффекта пика Брэгга, например, накапливая дозу в нужной области облучением опухоли с разных сторон, что неэффективно в смысле потери

локализации дозы, либо ослабить первичный пучок до нужных энергий. Возникает задача расчета и проектирования поглотителя частиц, который понижал бы энергию пучка, и при этом сводил к минимуму потери интенсивности пучка и уровень фона вторичного излучения, возникающего при прохождении пучком вещества поглотителя.

Моделирование фрагментации легких ядер

При использовании ионов углерода для терапии наблюдается явление фрагментации - развала ядер при столкновениях с атомами облучаемого вещества. К примеру, при поглощении первичного пучка в воде возможны процессы рассеяния ионов на атомах водорода, рассеяния с центральным либо периферическим ударом на атомах кислорода. Образующиеся ионы бора, кислорода, лития и прочие вторичные частицы продолжают дрейф в веществе, ухудшая локализацию дозы и повышая риск повреждений ДНК в здоровых тканях. Целесообразным является изучение и верификация существующих моделей, описывающих подобные процессы.

Высокопроизводительные вычисления

Моделирование сложных физических процессов требует больших вычислительных мощностей. Когда необходимо получить и обработать большое количество данных моделирования, важно наилучшим образом оптимизировать приложение, учитывая архитектуру вычислительной системы.

Пакеты Geant4 и Fluka позволяют произвести подобную оптимизацию, что является еще одним важным направлением исследований. Приложения для обоих пакетов можно запускать в параллельном режиме на системах с распределенной памятью, с использованием средств MPI. Другое средство, позволяющее производить распределенные вычисления в пакете Geant4 - ParGeant, набор классов, использующий библиотеку TOP-C (Task Oriented Parallel C/C++). На рис. 4 представлен график времени выполнения приложения, описывающего прохождение заряженных частиц в газообразной среде, от числа задействованных процессоров.



Рис. 4

Использование реалистичных геометрических моделей

Для получения точных результатов вычислений, которые могут быть использованы для планирования лечения, необходимо переходить от простых моделей (вода, как вещество для расчета поглощенной дозы) к сложным средам, близким по химическому составу и физическим свойствам биологическим тканям. Одновременно нужно работать с геометриями, отражающими реальные формы злокачественных образований и органов человеческого тела. На начальном этапе можно использовать геометрические модели, составленные из примитивов и заполненные веществами, близкими по составу биологическим тканям, затем нужно рассматривать воксельные модели, которые могут быть получены непосредственно из данных томографий.

Авторы выражают благодарность учебно-исследовательской лаборатории СПРИНТ СПбГУ-Intel за поддержку.

ЛИТЕРАТУРА:

1. R. Wilson "Radiological use of fast protons" // Radiology, 1946:487-91
2. <http://www.fluka.org>
3. <http://geant4.cern.ch>