Cálculo de Dosis Absorbida en Radioterapia: Efecto Compton

José María Massa⁽¹⁾, Jorge H. Doorn⁽¹⁾, Rubén S. Wainschenker⁽¹⁾, Eduardo Caselli^{(2) (3)}

⁽¹⁾ INTIA, ⁽²⁾ IFAS, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional del Centro de la Provincia

de Buenos Aires, Paraje Arroyo Seco, Campus Universitario (7000), Tandil, Argentina.

⁽³⁾ CICPBA, Calle 526 entre 10 y 11, (1900), La Plata, Argentina

e-mail: {jmassa,rfw,jdoorn,ecaselli}@exa.unicen.edu.ar

RESUMEN

terapia mediante radiaciones La ionizantes, usualmente radiación gamma, rayos X y electrones, es una práctica médica muy utilizada para tratamiento contra el cáncer, ya que se aprovechan los beneficios de los efectos de la radiación ionizante sobre las células para destruir tejidos tumorales. La determinación de la dosis absorbida en un medio es de suma importancia para lograr un tratamiento eficaz. De todos los mecanismos para estimar la dosis absorbida, uno de los más apropiados es el cálculo utilizando un modelo matemático de la región afectada. Últimamente, las estrategias basadas en Monte Carlo se han presentado como las más eficientes y precisas. Los programas que realizan este cálculo utilizando diferentes estrategias han debido optar por alguna de las variantes en el compromiso, aún no resuelto apropiadamente, entre la calidad de la estimación y el costo temporal del cálculo involucrado. En cuanto al efecto fotoeléctrico, en trabajos anteriores se ha logrado una optimización considerable en el tiempo de calculo aprovechándose la naturaleza probabilística de los modelos utilizados. En el presente proyecto se aspira a propagar las

optimizaciones logradas en el efecto fotoeléctrico al efecto Compton, el cual influye aun mas que el fotoeléctrico en la energía depositada en el medio.

Palabras Clave: Radioterapia, Optimización, Monte Carlo

ENFOQUES POSIBLES

La radiación ionizante es capaz de retirar electrones de los átomos y cambiar la estructura molecular de las células. Cuando esto ocurre, la funcionalidad y la viabilidad de las células se ve afectada. Se cree que el DNA genético en el núcleo de las células es el blanco crítico para el daño inducido por la radiación.

La base de la radioterapia es que las células tumorales son más sensitivas que las células normales a la radiación ionizante. Esto ha sido observado a través de diversos parámetros para observar la respuesta de tejidos [1].

En los rangos de energía utilizados para radioterapia, los fotones pueden interactuar de cuatro maneras posibles: interacción coherente (Rayleigh), interacción incoherente (Compton), efecto fotoeléctrico y producción de pares. Las interacciones de los fotones y partículas con un medio son fenómenos aleatorios descriptos mediante probabilidades de ocurrencia. Las ecuaciones que modelan el camino libre de las partículas y las que determinan ángulos y energías son manipuladas para obtener sus funciones de distribución acumuladas utilizando números aleatorios para obtener estos datos [2]. El conjunto de interacciones que sufre una partícula (fotón, electrón, etc.) y su recorrido se denomina historia. Es imprescindible modelar una gran cantidad de historias para lograr un resultado coherente con la realidad de un procedimiento de irradiación.

Dependiendo de la energía de las partículas iniciales y del tipo de radiación empleada, se producirán gran cantidad de historias, ya sea de partículas iniciales o secundarias generadas durante el proceso.

Esto lleva a que se debe realizar gran cantidad de cálculos para cada interacción y además a utilizar grandes cantidades de números aleatorios para modelar estas interacciones.

Gran parte de las estrategias de cálculo existentes basadas en el método de Monte Carlo se basan en lo que se conoce como función de rechazo, que permite obtener aquellos resultados considerados "válidos" desde el punto de vista del problema. La utilización de estas funciones de rechazo, llevan a un incremento de la cantidad de números aleatorios necesarios para el cálculo [**2**].

A modo de ejemplo, una corrida típica de Monte Carlo para realizar un cálculo de dosis lleva 1198.1 minutos con una energía inicial de 521 kev sobre un Pentium III [**3**].

La importancia de la reducción del tiempo de cálculo de la dosis radica en que para encontrar la distribución espacial de la energía depositada en un objeto, o para realizar la planificación de un tratamiento oncológico, se debe calcular la dosis depositada para varias configuraciones posibles (cantidad de partículas, ángulos, distancia y energía). Esto significa que el tiempo de cálculo de dosis para una configuración se multiplica por la cantidad de configuraciones a analizar, por lo que los tiempos de planificación de un tratamiento oncológico se estiran a varios días si se utilizan las soluciones mencionadas anteriormente.

RESULTADOS YA OBTENIDOS: EFECTO FOTOELECTRICO

Las variables involucradas en el cálculo de la historia de las partículas dependen en gran medida de las secciones eficaces de los elementos del medio para distintas energías. La sección eficaz se define como la probabilidad de interacción entre una partícula y un átomo. Esta probabilidad depende fuertemente de la energía de la partícula incidente.

Como se señaló antes, debido a que un algoritmo que utilice la estrategia Monte Carlo se nutre de números aleatorios para modelar cualquier cálculo que involucre probabilidades, el estudio de las secciones eficaces es relevante para la reducción del cálculo ignorando interacciones prácticamente improbables en determinados rangos de energía.

Para cada una de las interacciones posibles, existen expresiones matemáticas que modelan las variables involucradas. Estas expresiones relacionan la variable con su probabilidad de ocurrencia para determinadas condiciones de energía y dirección inicial. Mas específicamente, se conocen las distribuciones de probabilidad de las variables, con lo cual para el cálculo de las mismas es posible utilizar Monte Carlo utilizando el método inverso.

Uno de los factores fundamentales en la reducción del tiempo de cálculo es la determinación de la función de densidad de probabilidad acumulada para cada una de estas variables con el objeto de evitar la necesidad del uso de la función de rechazo.

Una vez determinada la función de densidad de probabilidad acumulada, se puede utilizar un generador uniforme para obtener la variable que se quiere determinar.

En la interacción fotoeléctrica, un fotón interactúa con un átomo, el cual absorbe el fotón y emite un electrón con un cierto ángulo y energía. Una conocida estrategia basada en el método de Monte Carlo para calcular el ángulo del fotoelectrón utiliza una función de rechazo para descartar todos los números aleatorios que no llevan a ángulos "válidos".

La optimización propuesta permitió obtener una función de densidad de probabilidad acumulada para la obtención del ángulo del fotoelectrón. De esta manera se utilizó un generador de números aleatorios de distribución uniforme mediante el cual se obtiene la distribución de ángulos utilizando un o solo de estos números.

Las reducciones de tiempo se ubican en factores de 7 a 1 respecto del método con función de rechazo. En cuanto a la reducción de números aleatorios utilizados, el factor es de 6 a 1.

En este trabajo se propone una estrategia similar para reducir el tiempo de cálculo para la interacción Compton.

PROPUESTA 1: EFECTO COMPTON

En la interacción Compton, un fotón de energía E interactúa con un electrón atómico, el cual lo absorbe y re-emite un fotón secundario de energía E' en la dirección $\Omega = (\theta, \phi)$ relativa a la dirección del fotón original. Luego de una interacción Compton con la capa *i*, el electrón activo es expulsado a un estado libre con energía cinética $E_e = E - E' - U_i > 0$, donde U_i es la energía de ionización del shell considerado, y el átomo residual queda en un estado excitado con un hueco en la capa *i*. En la figura 1 se observa un esquema del efecto Compton [**4**].



Fig. 1: Esquema del efecto Compton

La densidad de probabilidad que emerja un fotón secundario con un ángulo θ , una energía residual E´ a partir de la interacción con un electrón cuyo momento inicial es p y su proyección sobre la dirección del fotón incidente es p_z, depende de 3 variables θ , E´y p_z. Esta probabilidad esta expresada en la ecuación (1).

$$P_{Co}(\cos\theta, E') = \left(\frac{E_c}{E}\right)^2 \left(\frac{E_c}{E} + \frac{E}{E_c} - sen^2\theta\right)$$
$$\times F(p_z) \left(\sum_i f_i J_i(p_z)\Theta(E - E' - U_i)\right) \frac{dp_z}{dE'}$$

Ec. (1)

Integrando la ecuación (1) sobre E' se obtiene una expresión para la probabilidad de obtener cierto ángulo independientemente de E'. Esta expresión se observa en la ecuación (2) donde $S(E,\theta)$ es la función de dispersión incoherente [5].

$$P_{\theta}(\cos \theta) = \left(\frac{E_c}{E}\right)^2 \left(\frac{E_c}{E} + \frac{E}{E_c} - sen^2\theta\right) S(E,\theta)$$

Ec. (2)

El algoritmo clásico para la obtención del ángulo consiste en una serie de pasos que incluyen una función de rechazo. Además la obtención de la energía involucra otra función de rechazo.

Este esquema de rechazo, si bien mucho mas complejo que el tratado en el cálculo del ángulo del fotoelectrón en el efecto fotoeléctrico, se puede atacar de una manera similar intentando obtener una expresión de función de densidad de probabilidad acumulada.

Por la dificultad del uso de la ecuación (2) para la obtención en forma analítica de la densidad de probabilidad acumulada, se propone la resolución de esta integral por métodos numéricos preservando E como parámetro.

Analizando en detalle la ecuación (2) se tiene que existen diferentes expresiones de $S(E, \theta)$ dependiendo de la energía del fotón incidente, del átomo con el cual interactua y de la capa en la que se encontraba el electron extraido. En la figura 2 se presentan estos casos bajo la simplificación habitual para elementos típicos de tejidos humanos (Carbono, Hidrogeno, Oxigeno y Nitrogeno) de asimilar los suborbitales S2 y P2 a un solo orbital promedio.

1. ATOMO DE HIDROGENO	
1.1. 1.2.	$\begin{split} & E <= U_1 / 2 + (U_1^2 / 4 + m_e c^2 U_1 / 2)^{V_2} \\ & E > U_1 / 2 + (U_1^2 / 4 + m_e c^2 U_1 / 2)^{V_2} \end{split}$
2. ATOMOS DE OTROS ELEMENTOS	
2.1. 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3.	$\begin{split} &U_1 < E \\ &U_1 < E < U_2 / 2 + (U_2^2 / 4 + m_e c^2 U_2 / 2)^{V_2} \\ &E > U_2 / 2 + (U_2^2 / 4 + m_e c^2 U_2 / 2)^{V_2} \\ &E < U_1 / 2 + (U_1^2 / 4 + m_e c^2 U_1 / 2)^{V_2} \\ &E > U_1 / 2 + (U_1^2 / 4 + m_e c^2 U_1 / 2)^{V_2} \end{split}$
2.2.	$U_2 < E <= U_1$
Donde E es la energía del fotón incidente, U_1 es la energía de ionización de la capa 1, U_2 es la energía de ionización de la capa 2, m_e es la masa del electrón y c es la velocidad de la luz	

Fig. 2: Casos de cálculo en Compton

PROPUESTA 2: ESTIMACION DE LA RELEVANCIA RELATIVA DE CADA EFECTO

Estudiando las secciones eficaces se puede conocer cuales de los efectos son irrelevantes por ser prácticamente improbable la interacción Compton para determinado rango de energías. Se realizó un estudio preliminar de las tablas de secciones eficaces para las interacciones con fotones calculadas y tabuladas por el Lawrence Livermore Nacional Laboratory. Estas tablas se encuentran agrupadas bajo el nombre de Evaluated Photon Data Library 97. El estudio preliminar realizado determinó que existen rangos donde el efecto Compton es dominante respecto de los otros y también donde, si bien no es dominante, es altamente probable que ocurra. En la figura 3 se puede observar una zona de dominancia del efecto Compton por sobre otros efectos y viceversa.

Para algunos de estos casos se ha podido obtener de forma numérica la integral de la probabilidad acumulada del ángulo, por lo que es posible aplicar el método utilizado en el efecto fotoeléctrico con éxito para la reducción del tiempo y de la cantidad de números involucrados.



Fig. 3: Secciones eficaces para Hidrogeno

El resultado esperado para cada caso será una tabla como la que se representa en la figura 4.



Fig. 4: Modelo de tabla a obtener

El espaciado y la tecnica de interpolación (bilineal o bicúbica) deben ser seleccionada para cada tabla mediante un compromiso espacio-tiempo de cálculo para obtener un error aceptable.

CONCLUSIONES

Se ha mejorado el tiempo de cálculo para el efecto Fotoeléctrico en un factor de 7 a 1.

Por otro lado, se han comenzado los trabajos para mejorar el tiempo de cálculo en el efecto Compton.

Además se planifica aprovechar la exclusión del cálculo de los efectos muy improbables para cada energía.

BIBLIOGRAFIA

[1] Ahnesjö A., "Dose calculations for external photon beams in radiotherapy" Topical Review. Phys. Med. Biol. 44 (1999) R99–R155.

[2] Salvat F., Fernández Varea J., Sempau J. 2003. "PENELOPE – A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport". Workshop Proceedings Issy-les-Moulineaux, France 7-10 July 2003

[3] Ma D, Li J, Pawlicki T. "A Monte Carlo dose calculation tool for radiotherapy treatment planning". Phys Med Biol. 2002 May 21;47(10):1671-89

[4] Bielajeu, Alex F. "Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport". The University of Michigan, Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences. 2001.

[5] Ribberfors and Berggren "Incoherent X-Ray Scattering functions and cross sections", 1982 Phys. Rev. A 26, 3325–3333

[6] RAND Corporation. 1955. "A Million Random Digits with 100000 Normal Deviates".

[7] Stankovi J, Lali D, Ili "Different Modelling of Electron Transport In Monte Carlo Dose Calculation In Radiation Therapy"

[8] Bliznakova K., Kolitsi Z., Pallikarakis N. 2003. "A Monte Carlo based radiotherapy simulator".

[9] Turner J. E., Wright H. A., Hamm R. 1985. "A Monte Carlo Primer For Health Physicists".

[10] Rogers D., 2002, "Monte Carlo Techniques in Radiotherapy"

[11] Foppiano F, Guatelli S, Moscicki J, Pia M., 2003, "Distributed Processing, Monte Carlo and CT Interface For Medical Treatment planning".

[12] Börgers C., "Complexity of Monte Carlo and deterministic dose calculation methods".

[13] Massa J, Doorn J, Wainschenker R, Caselli E. "Cálculo de dosis absorbida en radioterapia". WICC 2005, Rio Cuarto.

[14] Massa J, Doorn J, Wainschenker R, Caselli E. "Cálculo de dosis absorbida en radioterapia". Bienal de Ciencia y Tecnología 2005, CICPBA, La Plata.