

SIMULACIÓN DE “COMPTON IMAGING” CON *GEANT4* Y SU APLICACIÓN EN LA MEDICINA

“COMPTON IMAGING” SIMULATION USING *GEANT4* AND ITS APPLICATION IN MEDICINE

Huber Nieto-Chaupis*; Elías Catalán-Sánchez**

RESUMEN

En este reporte presentamos los resultados de una investigación realizada con el software *GEANT4*, que es usado ampliamente en física de altas energías y que tiene aplicaciones también en las áreas de la medicina no invasiva. Nos centramos en el llamado *Compton Imaging*, que permite reconstruir en 3D la composición de tejidos humanos a partir de interacciones cuánticas de fotones con materia. Se simula el haz de fotones de 500 keV que colisiona con tejido humano y la reconstrucción de los fotones dispersados, que es llevada a cabo con una simulación de un detector basado en Germanio; presumimos que el detector está a unos pocos centímetros de la región de interacción. Para el presente estudio, los resultados muestran que el *Compton Imaging* requiere de baja dosificación, del orden de 0.5 mSv, si lo comparamos con tomografías que requieren más de 1 mSv para un área de 25 cm². Esto significaría dos aspectos positivos: menos riesgo de exposición a radiación para pacientes que necesitarían varias sesiones dentro de un esquema de terapia oncológica, y un posible aumento de la probabilidad de éxito mientras dura el tratamiento.

ABSTRACT

In this report we present the results of research conducted with *GEANT4* software, which is widely used in high-energy physics and also has applications in the areas of non-invasive medicine. We focus on the so-called Compton Imaging, which allows reconstructing 3D human tissue composition from quantum interactions of photons with matter. It simulates the beam of 500 keV photons colliding with human tissue and reconstruction of scattered photons, which is carried out with a simulation of a germanium -based detector, based on the assumption that the detector is a few inches from the interaction region. In this study, the results show that Compton Imaging requires low dosage, in the order of 0.5 mSv, when compared with CT scan that require more than 1 mSv for an area of 25 cm². This implies two positive aspects: a lower radiation exposure risk for patients who require multiple sessions within a cancer therapy framework, and a possible increase in success probability during treatment.

* Unidad de Postgrado FIEE-Universidad Nacional Mayor de San Marcos. <hnieto@physik.hu-berlin.de>.

** Universidad Privada Norbert Wiener.

I. INTRODUCCIÓN

En el presente los conocimientos de la Física en sus niveles más profundos se aplican exitosamente a muchas disciplinas científicas, entre ellas la medicina humana. Con la Física aplicada, no solo se han desarrollado novedosas tecnologías basadas en dispositivos electrónicos avanzados que han contribuido de manera decisiva en la acción del diagnóstico médico, sino que también ha servido para desarrollar metodologías clínicas para enfrentar diversas manifestaciones de enfermedades con una alta tasa de mortalidad como el cáncer (por ejemplo) y sus variantes. En efecto, hoy en día uno de los retos de la medicina moderna consiste en encontrar nuevos procedimientos para encarar y dar fin a las presencias cancerígenas en seres humanos. Actualmente, existen técnicas tomográficas muy avanzadas que permiten visualizar en gráficas tridimensionales la constitución interna de órganos con el fin de evaluar su funcionalidad y la real situación del paciente, y de aquí proceder con el diagnóstico médico, con una precisión llevada a cabo sin precedentes. Al igual que en otras técnicas de diagnóstico no invasivo, aparece la pregunta de si la radiación por la exposición de la tomografía tiene una naturaleza inocua en los seres humanos. En otras palabras, ¿existen otras técnicas tomográficas que requieran de un menor tiempo de exposición a la radiación y, sobre todo, una menor dosis de radiación de tal forma que sea mínimo el riesgo del paciente, pero óptimo en el sentido de asegurar un excelente diagnóstico?

Aquí presentamos los resultados de una simulación computacional del llamado *Compton Imaging*, una técnica multidisciplinaria que apareció en los años 90 del siglo pasado; consiste en irradiar de

fotones a cierta energía sobre una región o sector de interés del cuerpo humano con el fin de obtener una imagen de tipo tomográfico sin exponer a una alta dosis de radiación al paciente. El principio base es el llamado efecto *Compton* [1] [2], que supone dos etapas: en la primera se da la colisión del fotón energético sobre un electrón; en la segunda etapa, el fotón y el electrón se dispersan con un ángulo individual y diferente con respecto a colinealidad del fotón inicial. La técnica *Compton Imaging* pone atención a los fotones dispersados, tanto a sus energías como a su topología geométrica. La medida de ambas variables es crucial para la reconstrucción del medio dispersor. Hemos simulado el *Compton Imaging* con el software GEANT4, presumiendo energía de 500 keV por haz de fotones para un sector de tejido humano (tejidos muscular y óseo) por medio de la reconstrucción de los fotones dispersados en un volumen de Germanio, que cumple el rol de detector. En la segunda sección se repasa los principios detrás del *Compton Imaging* planteando las ecuaciones básicas que conforman la simulación computacional. En la tercera sección se introduce al software GEANT4, explicando su funcionalidad para la simulación del efecto *Compton* en el tejido humano. En la cuarta sección se presentan los resultados de la simulación. Finalmente, se bosquejan las conclusiones y recomendaciones a partir de los resultados.

II. EL EFECTO COMPTON Y LA INTERACCIÓN FOTÓN-ELECTRÓN

El efecto *Compton* consiste en la colisión de un electrón y un fotón. El fotón es una partícula elemental y es el constituyente más fundamental de la radiación, es decir es lo que compone a la radiación. No tie-

ne carga eléctrica ni masa, pero viaja a la velocidad de la luz, 3×10^8 m/s. En laboratorios muy sofisticados es posible realizar experimentos con un solo fotón. Pero en general los fotones viajan en grupo de acuerdo a su fuente inicial. Mientras más fotones viajen de manera unida, se tendrá más efectos sustanciales en la materia. Por ejemplo, un laser de alta intensidad emite 10^{20} fotones por cm^3 y por segundo. Este láser puede atravesar hasta metales dependiendo de la energía del grupo.

Por otro lado, el electrón es una partícula elemental y parte fundamental de los átomos. El electrón posee carga eléctrica negativa, masa del orden de 9.1×10^{-31} Kg y spin $-1/2, +1/2$. Los electrones pueden ser arrancados de un átomo si están en un estado tal que el núcleo no tiene suficiente energía para mantenerlo en su órbita. En otras palabras, los electrones no son partículas libres en principio, como lo son los fotones. Cuando el fotón colisiona con un electrón, ya sea en los sistemas de referencia donde puede estar en reposo o en movimiento, este se dispersa a un ángulo de dispersión dado por el

$$\cos \theta = 1 + \frac{m_e}{E} - \frac{m_e}{E'} \quad (1)$$

donde m_e es la masa del electrón, mientras que E y E' son las energías del fotón incidente y el dispersado, respectivamente. El ángulo θ denota la apertura del fotón dispersado con respecto al fotón incidente. La diferencia de energía entre el fotón incidente y dispersado se puede escribir así:

$$T_{\max} = \frac{E}{1 + \frac{m_e}{2E}} \quad (2)$$

donde "max" denota el valor máximo de la diferencia de energías. En realidad, los cálculos matemáticos para derivar relaciones que serán útiles para la simula-

ción requieren de manipulaciones de las reglas de la mecánica cuántica relativista. Un observable de interés para llevar a cabo las simulaciones con cierta confiabilidad es la sección eficaz por unidad de ángulo sólido, y que simplemente es la probabilidad de detectar a un fotón dispersado por un electrón, dentro un ángulo sólido, y se escribe como [3],

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^2 \left[\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2 \theta \right] \quad (3)$$

que es la sección eficaz de Klein-Nishina, donde r_e es el radio del electrón y tiene un valor de 2.8×10^{-15} m. Por otra parte, si se asume simetría esférica, se tiene que el ángulo sólido tiene la forma $d\Omega = \sin^2 \theta d\theta d\phi = 2\pi \sin^2 \theta d\theta$. Ya que la mecánica cuántica está basada en probabilidades, uno debe ajustar la ecuación (3) de tal forma que la probabilidad de emisión sea máxima. Este ajuste se lleva a cabo escaneando los valores reales, es decir aquellos que podrían ser accesibles en circunstancias experimentales. Sin embargo, lo más real es que el fotón dispersado tenga una fracción de la energía del fotón incidente. La fracción va a ser definida por la cantidad de energía absorbida por el medio dispersor, es decir el tejido humano. Por razones de simplicidad no se consideran múltiples interacciones, ya que esto degrada a sus valores mínimos la energía del fotón dispersado, y la probabilidad de detección resultaría ser mínima.

III. SIMULACIÓN CON EL SOFTWARE GEANT4

Nuestro estudio usa el software GEANT4, que es escrito en el lenguaje c++ usado ampliamente en física de alta energía y que tiene como principal rol el de simular la respuesta de un detector a partículas elementales.

En el presente, el CERN, en Suiza, usa este software como el principal programa computacional para la simulación de la detección del Bosón de Higgs, en sus detectores ATLAS y CMS. El proyecto del ILC [1] en DESY también confía en la funcionalidad de GEANT4 para simular la respuesta del detector en los estados finales a partir de las colisiones de electrones y positrones. Una virtud ventajosa del software GEANT4 es su flexibilidad en la implementación de nuevas fenomenologías que son procesadas por el software, lo que implica que no está únicamente restringida para análisis de detección de partículas elementales, sino que abarca estados de interacción de partículas y materia macroscópica (tejido humano).

De todo lo explicado es importante recalcar que el GEANT4 provee datos simulados de manera numérica; por tanto, es necesario un profundo conocimiento del fenómeno en cuestión, para hacer una óptima interpretación de los resultados. Para la presente investigación hemos usado el GEANT4 versión 4.8.1 instalado en Linux Mandriva. El *script* que se ha adaptado al diagrama de flujo del GEANT4 contiene un algoritmo que procesa la información inicial a través de las reacciones *Compton* que sufre el fotón incidente. La implementación del *script* es entonces declarado en el *Makefile* del GEANT4. Durante la compilación del software, es importante revisar las incompatibilidades de las variables declaradas en el *script* y las variables intrínsecas de GEANT4. La estructura de la implementación del *Compton Imaging* usa la forma ya existente del caso de LINAC (acelerador lineal). La formulación del diagrama de flujo está dada como sigue:

Haz de fotones y electrones: El haz de fotones tiene una energía de 500 keV

y para su simulación se presume que es disparado frontalmente hacia el espacio orgánico. Se presume que el recipiente de electrones está en reposo con respecto al haz incidente de electrones, tal que las ecuaciones (1), (2) y (3) son válidas. El radio del haz de fotones incidentes es presumido como colimado dentro del orden de 0,001 cm.

Geometría del tejido orgánico: Presumimos una muestra de volumen dada por $2 \times 3 \times 2 \text{ cm}^3$. Este volumen es a su vez subdividido en $5000 \times 3000 \times 5000$ celdas. En total se tienen 7.5×10^{10} celdas espaciales. Presumimos que por cada 10^4 celdas hay al menos una probabilidad mayor que 0.5 en donde un electrón está preparado para interactuar con el fotón incidente a través del efecto *Compton*. Las probabilidades son calculadas a partir de la composición orgánica del tejido humano, obtenidas de DICOM y se presentan en la Tabla 1.

TABLA 1

Material	Densidad (mg/cm ³)		Cono Rango	Absorción (%)
	Mínimo	Máximo		
Agua + Cg	1.004	1.043	0 10	15
Músculo	-1.109	1.113	5 12	35
Óseo	1.496	1.654	10 40	55

Dinámica de la Dispersión de Compton: La simulación emplea el método de Monte Carlo, que es un algoritmo que consiste en aceptar o rechazar un evento si no está dentro de un rango de valores deseados. Para aplicar eficientemente el algoritmo es necesaria una probabilidad general que describa la existencia de un evento para su posterior aceptación o rechazo. Usando (3), podemos entonces reescribirla así:

$$P_N(E') = \int_0^{\theta_c} \left(\frac{E'}{E} \right)^2 \left[\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2 \theta \right] \sin^2 \theta \, d\theta \quad (4)$$

Donde P_N es la probabilidad de un evento *Compton* con un fotón dispersado con energía E' y con el límite superior de la integral denotando el ángulo final de un fotón a su salida de la región de interacción. De acuerdo a la subdivisión de la muestra, entonces van a existir 7.5×10^6 de electrones con congruencia para efectuar el efecto *Compton*. Para que el cálculo sea consistente, definimos un haz de 10^{12} fotones que colisiona con la muestra $2 \times 3 \times 2 \text{ cm}^3$.

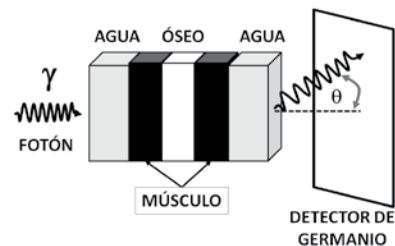
Ya que no solo existe la dispersión de *Compton* al momento de la interacción de fotones con el tejido humano, es muy posible la existencia de otros fenómenos cuánticos que también van a tener en su estado final a un fotón energético y que también van a ser detectados por el detector de Germanio. Estos efectos secundarios resultan después de excitar los átomos inyectándoles una energía electromagnética en forma de fotones, lo que produciría transiciones del estado más alejado a uno más cercano, emitiendo un fotón de baja energía, siendo del 0.01 % de la energía de los incidentes. A estos fotones los vamos a denominar “secundarios” y van a constituir el *background* de la señal [4]. Para una óptima detección, adjudicamos a los fotones primarios o *Compton*, una polarización del tipo lineal, mientras que los secundarios no poseen una polarización definida. Esto define nuestro criterio para discriminar la señal del *background*. La Figura 1 completa la idea expuesta.

Estadística de los conteos *Compton*:

Usando la ecuación (4) es factible realizar cálculos numéricos. Por ejemplo, ingresa un fotón con una energía de 500 keV, y final de 250 keV; luego evaluamos la integral (4) con el rango general dado por la tabla 1, entre 0 y 40 grados. Se identifica que la probabilidad de absorción

por parte del tejido humano es debida al tejido óseo. Luego se registra el evento con una energía de 250 keV y un ángulo final promediado en los 7.5×10^{10} células. Si el ángulo resultante está fuera del rango entre 10 y 40 grados, entonces no corresponde a uno del tipo *Compton*, y se procede a rechazar el evento [5]. Para generalizar los eventos aceptados y rechazados, modelamos el tejido humano por medio de una función Gaussiana normalizada a la unidad.

FIGURA 1



Representación gráfica del *Compton Imaging* para el caso de un sándwich de agua y compuestos de grasa (Cg) con tejido óseo y muscular. El fotón resultante llega al detector de Germanio a un ángulo θ y con una energía E' .

Simulación del Detector: Una vez que los eventos son simulados, ellos son agrupados por *clusters* de geometría cuadrada y con una resolución de 1 mm^2 , es decir $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$. Ya que el detector no es perfecto, presumimos una degradación en los vértices del cuadrado $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$, con mayor detección en las zonas centrales y con una probabilidad de detección del 80 %. El detector acepta eventos por encima del 60 %, lo que garantizaría que una fracción arriba del 50 % de los fotones *Compton* y los secundarios sean finalmente detectados. Además, se ha presumido que la distancia entre el detector y el tejido humano es de 10 cm. Para el presente estudio, esta distancia no tiene un papel crucial en los resultados.

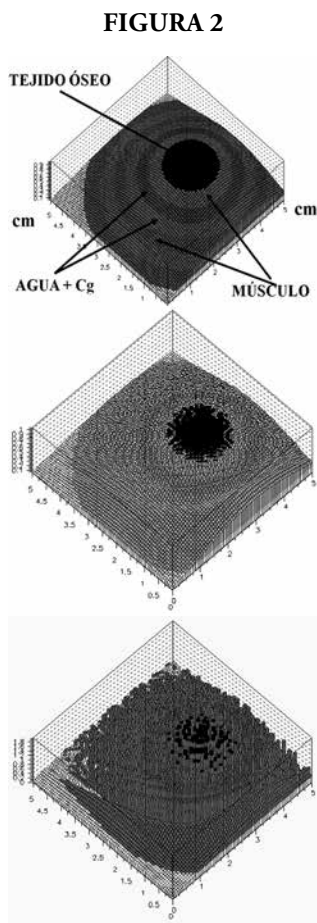
Configuración de GEANT4: Se ha usado y modificado las siguientes librerías de paquete medical_linac, DICOM y GammaTherapy en su forma de *headers files*, para crear el paquete Compton Imaging. La configuración del nuevo paquete es nueva información para el Makefile que administra los archivos nuevos a ser compilados y ejecutados. Hemos usado también durante la compilación el paquete ROOT, que realiza los histogramas generados por el nuevo paquete. La generación y procesamiento de los eventos fue dividida en 32 JOBS o tareas para tres procesadores CORE-2-DUO INTEL. El tiempo total de procesamiento por CPU fue de 6 horas para 2.5 millones de eventos *Compton*. Las librerías de mayor relevancia son presentadas en la tabla 2, así como su paquete de procedencia.

TABLA 2

Procedencia del Paquete	Header
Linac	MedLinacPhysicsList.hh
Linac	MedLinacPhantomSD.hh
Linac	MedLinacPhantomHit.hh
Linac	MedLinacEventAction.hh
DICOM	DicomGeometry.hh
GammaTherapy	Histo.hh

IV. RESULTADOS Y RECOMENDACIONES

Los resultados se muestran en la Figura 2. En el panel superior se observa la reconstrucción de los fotones *Compton* sin detector, es decir, sin haber alcanzado el detector de Germanio. Aplicamos a un brazo de 5 cm de diámetro de un adulto joven. Se muestra la sección transversal en 3D, en sus mínimos componentes: hueso (30 %), músculos (20 %) y agua con aditivos de grasa (50 %).



Arriba: sección transversal en 3D de un brazo de un joven adulto de diámetro de 5cm. Centro: reconstrucción óptima con discriminación del 85 % de eventos *background* con un haz de 500 keV. Abajo: lo mismo, pero con una discriminación del 25 % del *background* con un haz de 10 keV.

En el centro se muestra la reconstrucción en el detector, con una excelente discriminación de hasta el 85 % de los eventos *background*, aquellos que tienen en el estado final un fotón con energías entre 10 a 400 keV. Para este fin, rechazamos aquellos eventos que no cumplen con la condición de polarización de los fotones incidentes. También rechazamos eventos que poseen un bajo componente longitudinal con un momento del orden de 50 keV o menos.

Estos eventos provienen en su mayoría de la interacción de moléculas y otros componentes del tejido óseo y producen múltiple dispersión, degradando sustancialmente la energía primaria del fotón incidente. En el panel inferior de la Figura 2 se observa una pobre reconstrucción de los eventos *Compton* con un haz de 10 keV, lo que indicaría que habría una sobre población de eventos *background*, haciendo una tarea muy difícil la discriminación de estos eventos que consisten en fotones de baja energía. Para el cálculo de la dosis absorbida, calculamos el número de fotones *Compton* iniciales y le restaemos aquellos que llegaron al detector y lo multiplicamos por el factor de energía para finalmente asociarle el factor de unidades en mSv.

Así, para un haz de 10^{12} fotones con una energía nominal de 500 keV, la dosis resulta ser del orden de 0.5 mSv en el escenario de una excelente reconstrucción. Sin embargo, en los casos donde una mínima precisión es requerida, como en la figura 2 (abajo), una dosis de 0.3 mSv, que es la tercera parte que requeriría una dosis en una convencional tomografía computacional [6], es suficiente. Para calcular la eficiencia de detección usamos la siguiente relación:

$$e = \frac{S}{S+B} \times e_D \times e_C \quad (6)$$

Donde S =número de eventos de la señal, B =número de eventos del *background*, e_D =eficiencia del detector y e_C =eficiencia de la calibración del detector, distancia, y haz incidente.

La eficiencia permite medir el éxito del experimento. Para el presente caso, hemos obtenido una eficiencia del orden del 77 %, que representa la eficiencia de la simulación. La transferencia de los *inputs* a un experimento real, conlleva a disminuir este valor, hasta un 10 % del valor nominal, es decir, la eficiencia en la realización experimental sería del orden del 70 %. En otras palabras, la dosis estimada sería 0.5 ± 0.015 mSv, aún así estando por debajo del valor esperado en tomografías convencionales. Es importante recalcar que el aumento de energía no podría garantizar una efectiva reconstrucción. Solamente un detector que realice acciones de discriminación de eventos del *background* provee confiabilidad para un preciso y efectivo diagnóstico médico.

V. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Nieto-Chaupis H. Tesis Doctoral PhD en Universitat Humboldt zu Berlin, 2008.
2. Lenti M. Nucl. Instrum. Methods A 588, (2008) 457.
3. Bjorken JD; Drell SD. Relativistic Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1964.
4. Agostinelli *et alii*. GEANT4 Collaboration, Nucl. Instrum. Methods A 506, (2003) 250.
5. Knoll GF. Radiation Detection and Measurement, Wiley and Sons, New York, 2nd edition, 1989.
6. Lenti M; Veltri L. arXiv:1106.2391.