

文章编号: 1007-4627(2008)02-0154-06

模体厚度对 MC 程序计算速度与效率的影响研究*

林 辉¹, 陈冬颖¹, 吴东升², 李国丽³, 景 佳^{1,4}

(1 合肥工业大学理学院, 安徽 合肥 230009;

2 合肥工业大学科研处, 安徽 合肥 230009;

3 浙江工业大学信息工程学院, 浙江 杭州 310014;

4 中国科学院等离子体物理研究所, 安徽 合肥 230031)

摘 要: 基于蒙特卡罗(MC)程序 MCNP4c, DOSXYZnrc, DOSRZnrc 和 DPM, 考察了模体厚度变化对 MC 程序计算速度和 MC 效率的影响, 发现模体的厚度变化对不同 MC 程序速度提升的影响差异较大, 其中 DOSXYZnrc 提升最多, DOSRZnrc 提升最小。从 MC 效率方面来讲, DPM 和 DOSRZnrc 具有明显的优势。就 4 个程序而言, 薄模体均表现出一定的 MC 效率优势。从 MC 效率提升角度来看, MCNP4c, DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 表现出一定的相似性, 而 DPM 相对低些。也对 DOSRZnrc 异常的统计不确定性特征、速度提升进行了研究, 发现其内部植入的光子强迫方差减小技巧在降低体元统计不确定性的同时, 也削弱了薄模体的速度优势。但是由于显著影响了方差, 所以总体来讲, 仍然提高了 DOSRZnrc 薄模体的 MC 模拟效率。

关键词: 蒙特卡罗程序; 模体厚度; 计算速度; 蒙特卡罗效率

中图分类号: R730.55

文献标识码: A

1 引言

蒙特卡罗(Monte Carlo, 简称 MC)方法通过对粒子与物质相互作用进行随机模拟, 获得粒子在人体组织中沉积能量的分布, 被认为是当前所有剂量计算方法中最精确的一种。但是 MC 算法存在收敛速度慢、计算时间长的致命弱点, 阻碍了其在临床放射治疗计划中的广泛应用。如何在保持高精度的前提下加快计算速度, 是目前 MC 剂量计算方法面临的主要课题^[1, 2]。

MC 程序的计算速度与计算模型体积大小有一定关联, 通过减小计算模型的体积可有效缩短计算时间。前期工作^[3]基于快速 MC 程序 DPM 模拟研究了模体大小对计算速度与计算精度的影响。通过改变模体的厚度, 发现除在尾部有限的范围内会出现差异外, 薄模体与厚模体的结果差别很小, 然而却可以获得模拟效率的指数性提升。将此研究结果用于临床头部实例, 获得了计算速度的大幅提升。

MC 方法是一种统计模拟方法, 其计算结果应同时伴随统计不确定性估计, 这对于正确评估放射治疗计划非常重要^[4]。为正确评估 MC 程序的计算结果, 有效反映其计算精度与速度的综合效果, Roger 等^[5]给出了 MC 计算的效率评估公式:

$$\epsilon = \frac{1}{\sigma^2 T}, \quad (1)$$

式中 σ^2 是感兴趣区域的方差估计, T 是获得此方差的 CPU 时间。方差估计 σ^2 是基于模体中所有剂量大于 50% D_{\max} 的体元的统计不确定性 σ (即计算结果的标准差, 其中 D_{\max} 表示峰值剂量值), 采用如下公式进行计算^[5]:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i)^2, \quad (2)$$

公式中 N 表示所统计体元的总数, σ_i 表示所统计各体元的统计不确定性。

* 收稿日期: 2007-08-07; 修改日期: 2008-03-17

* 基金项目: 国家重点基础研究发展规划资助项目(2006CB708307); 合肥工业大学校科学研究发展基金资助项目(071002F); 合肥工业大学博士学位专项基金资助项目

作者简介: 林 辉(1973-), 女(汉族), 安徽阜阳人, 博士, 副教授, 从事精确放疗关键技术中的剂量计算方法研究; E-mail: linh@ipp.ac.cn

计算统计不确定性的方法通常有 3 种^[6]: 基于批的、基于历史的和基于事件的。其中基于历史的方法比较合理, 已广泛植入许多先进的 MC 程序(如 MCNP, DPM 及 EGS 用户程序 BEAMnrc, DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 中)。

MCNP^[7] 和 EGSnrc^[8] 是两个广泛用于医学剂量计算的经典 MC 程序, 它们依托成熟的粒子输运理论模拟粒子在介质中的输运过程, 获得准确的计算结果。MCNP 具有灵活的几何描述能力, 可描述任意一阶、二阶及部分四阶曲面形成的几何体。DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 是 EGSnrc 的两个剂量计算用户程序, 前者可用于模拟长方体模体, 后者用于模拟圆柱型模体。有限的几何编辑能力是 EGSnrc 的缺点, 而易学易懂易使用正是它的优点。DPM(Dose Planning Method) 为一种简单、快速 MC 程序^[9], 其编写目的是为了成为临床 MC 治疗计划的剂量计算工具。程序中为加快 MC 模拟速度, 对已有的成熟光子、电子物理输运模型做了许多简化和改进。

本工作欲基于 MC 程序 DPM, MCNP4c, DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 考察模体厚度变化对不同程序计算精度和速度的影响, 并基于 MC 效率理论, 考察了对 MC 效率提升的影响, 以便为本工作组正在发展的“精确放射治疗计划系统”(Accurate Radiotherapy System, 简称 ARTS)^[1] 的 MC 剂量验证工具的选择提供参考。

2 计算模型与模拟方法

本工作对两个实例进行了计算: 均匀圆柱型模体和均匀长方体模型, 具体描述如下。

2.1 圆柱型模体模型

本模拟采用 MCNP4c 和 EGSnrc/DOSRZnrc 进行。以半径为 15 cm, 高为 30 cm 的圆柱型水模(后称“模体 1”)作为基准, 然后按从大到小的顺序改变模体的厚度到 20 cm(后称“模体 2”)和 10 cm(后称“模体 3”)进行计算。网格划分沿径向为 0.5 cm, 沿深度方向为 0.2 cm。基准模体含有 $60 \times 150 = 9\,000$ 个体元。水密度为 1 g/cm^3 。模拟 6 MV Varian X 射线源^[10]。源皮距(Source Surface Distance, 简称 SSD)为 100 cm, 射野半径为 5 cm, 等效为 $10\text{ cm} \times 10\text{ cm}$ 。各程序计算结果按中心轴深度

1.5 cm 处剂量进行归一。按表 1 方案依次改变模体的厚度, 对计算时间、计算精度(以 4.90 cm 深度离轴剂量比(Off-Axis Ratio, 简称 OAR)为参照)及 MC 效率进行比较。

模拟参数如下: EGS/DOSRZnrc 中的电子、光子截断能分别为 $E_{\text{CUT}} = 700\text{ keV}$, $P_{\text{CUT}} = 10\text{ keV}$ 。其它参数采用默认值, 如 PRESTA-II 电子步长算法和 PRESTA-I 边界跨越算法。由于 E_{CUT} 和 P_{CUT} 在 EGS 中表示的是电子、光子总能量, 而 MCNP 中由用户输入的 CUT : E 和 CUT : P 表示截断的电子、光子动能。因此, 为与 EGS 具有可比性, 其 CUT : E = 200 keV, CUT : P = 10 keV。采用 * F8 记数卡和 ITS-style 能量标定算法。并采用 SI 和 SP 卡描述的圆锥型源方向偏倚技巧加速计算。

2.2 长方体模型

本模拟采用 EGSnrc/DOSXYZnrc 和 DPM 进行。以大小为 $30\text{ cm} \times 30\text{ cm} \times 30\text{ cm}$ 的均匀水模型(后称“模体 4”)作为基准, 然后改变模体的厚度到 10 cm(后称“模体 5”)进行计算。体元大小为 $0.5\text{ cm} \times 0.5\text{ cm} \times 0.2\text{ cm}$ 。基准模体含有 $60 \times 60 \times 150 = 540\,000$ 个体元。水密度为 1 g/cm^3 。模拟 6 MV Varian X 射线源^[10]。SSD 为 100 cm, 射野大小为 $10\text{ cm} \times 10\text{ cm}$ 。各程序计算结果按中心轴深度 1.5 cm 处剂量进行归一。对计算时间、精度(以 4.90 cm 深度 OAR 为参照)及 MC 效率进行比较。

EGSnrc/DOSXYZnrc 模拟参数设置同 EGSnrc/DOSRZnrc。采用 DPM 的点源方野模型(Centered square beam, point source)进行计算, 并植入了 Varian 6 MV X 射线能谱数据。模拟参数设置取程序默认值, 如电子、光子截断能分别为 200 和 50 keV。对于能量在 5.0 MV 以上的粒子, 步长采用 5 mm; 对于能量在 5.0 MV 以下的粒子, 步长采用 1 mm。

由于 DPM, DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 均采用了基于网格的记数方式, 因此输出所有体元的吸收剂量。而 MCNP4c 可选择性输出感兴趣点的剂量, 且计算速度与输出量之间有较大关联, 因此仅输出了中心轴百分深度剂量(Percentage Depth Dose, 简称 PDD), 4.9 cm 深度 OAR。

本工作的计算都是在同一个单机(Inter Pentium 4 处理器, 1.70 GHz CPU, 512 MB 内存)上进

行的。

3 结果

3.1 圆柱型模体模型

图 1(a)给出了 DOSRZnrc 与 MCNP 计算圆柱模体的 PDD 比较,同时给出了模体 2,3 相对于模体 1 的差异比较,可见厚薄模体的差异仅仅局限在尾部 0—0.4 cm 范围内。图 1(b)给出了 DOSRZnrc

减少对 MCNP 计算结果几乎没有影响,而 DOSRZnrc 的计算结果呈指数性下降。例如,模体 2 相对于模体 1 下降约 10%,而模体 3 相对于模体 1 下降约 40%。图 2(b)给出了 DOSRZnrc 与 MCNP 计算的 4.9 cm 深度离轴统计不确定性比较,显示出了同样的统计不确定性特征。其中,随模体厚度的减小,MCNP 在野内部分不变,在野外部分略有增大,反映了后部模体缺失对 4.9 cm 深度统计不确定的影响。此外, DOSRZnrc 也表现出明显的平移特征,若将其进行归一化处理,就可得到与 MCNP 同样的特征曲线。

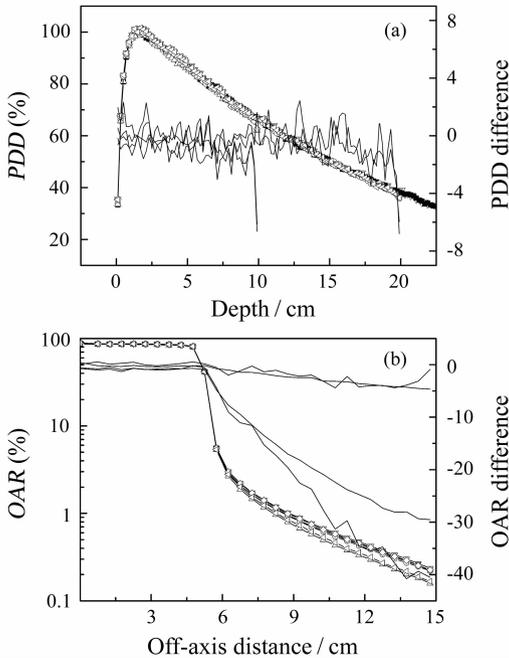


图 1 (a) DOSRZnrc 与 MCNP 计算的 PDD 比较; (b) DOSRZnrc 与 MCNP 计算的 4.9 cm 深度 OAR 比较
■ DOSRZnrc-Phantom 1; ○ DOSRZnrc-Phantom 2; △ DOSRZnrc-Phantom 3; ▽ MCNP-Phantom 1; ◇ MCNP-Phantom 2; ▹ MCNP-Phantom 3。

与 MCNP 计算的 4.9 cm 深度 OAR 曲线比较,同时也给出了模体 2,3 相对于模体 1 的差异比较。可见三者野内的差异(<1%)完全可以忽略,显著的差异仅仅表现在模体 3 相对于模体 1 的野外部分(约 30%—40%),这反映了模体 1 后部 20 cm 厚介质背散射所产生的主要是低能、大角度粒子,它们对野内高剂量区的影响是很小的,但对野外低剂量区就相对显著了。

图 2(a) DOSRZnrc 与 MCNP 计算圆柱模体的 PDD 统计不确定性比较,可见它们存在显著不同的特征。在跟踪相同数目的源光子后,模体厚度的

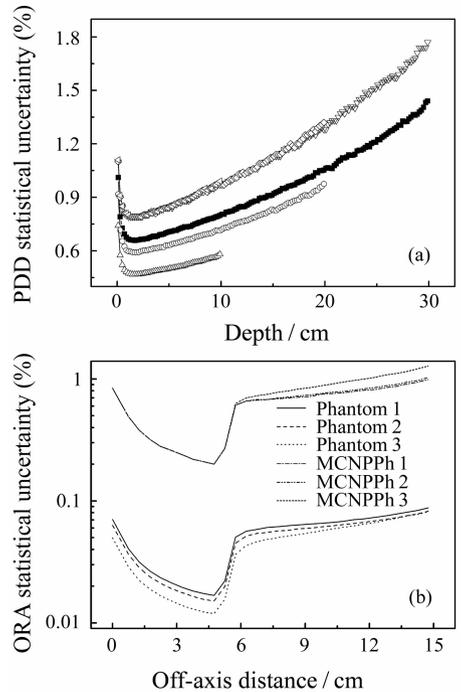


图 2 (a) DOSRZnrc 与 MCNP 计算的 PDD 统计不确定性比较; (b) DOSRZnrc 与 MCNP 计算的 OAR 统计不确定性比较
(a)中符号说明同图 1。

3.2 长方体模型

图 3 给出了 DOSXYZnrc 和 DPM 模拟模体 4, 5 的 PDDs 和 4.9 cm 深度的 OARs 比较,它们表现出与圆柱型模体相同的特征。图 4 给出了 PDD 和 OAR 统计不确定性比较,可见它们与 MCNP4c 表现出了相同的特征。此外还看到,在跟踪相同光子数后,DPM 的统计不确定通常比 DOSXYZnrc 高出约 1.84 倍,这应归于后者丰富的方差减小技巧。

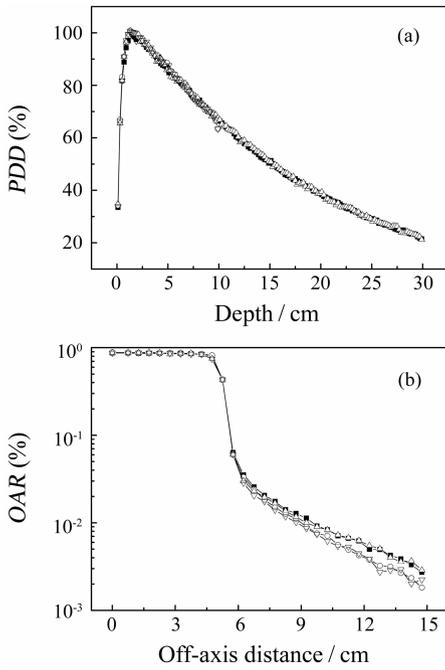


图 3 (a) DOSXYZnrc 和 DPM 计算的 PDD 比较；(b) DOSXYZnrc 和 DPM 计算的 OAR 比较

■ Phantom 5 DOSXYZnrc; ○ Phantom 6 DOSXYZnrc; △ Phantom 5 DPM; ▽ Phantom 6 DPM.

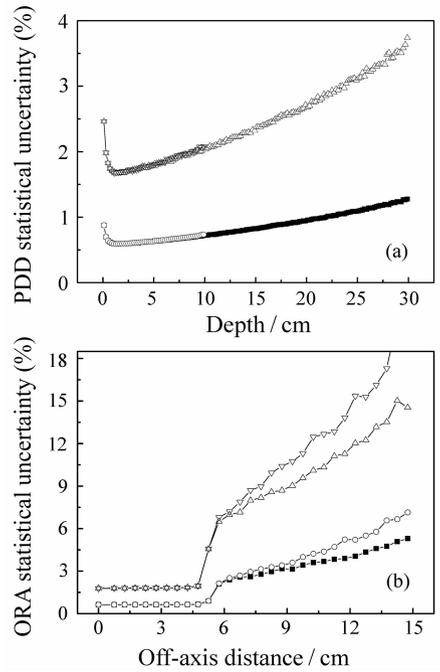


图 4 (a) DOSXYZnrc 和 DPM 计算的 PDD 统计不确定性比较；(b) DOSXYZnrc 和 DPM 计算的 4.9 cm 深度 OAR 统计不确定性比较

符号说明同图 3。

表 1 DOSRZnrc 和 MCNP4c 的计算比较

| 名称 | MCNP4c | | | DOSRZnrc | | |
|---|-----------------|-------|-------|----------|-------|--------|
| | 模体 1 | 模体 2 | 模体 3 | 模体 1 | 模体 2 | 模体 3 |
| 记数体元 | 180 | 130 | 80 | 4 500 | 3 000 | 1 500 |
| 模拟光子 | 1×10^8 | | | | | |
| t/min | 1 218 | 893 | 462 | 1 593 | 1 448 | 1 222 |
| 速度提升(%) | 0 | 36.4 | 163.6 | 0 | 10.1 | 30.1 |
| 1.5 cm 深度统计不确定性(%) | 0.79 | 0.79 | 0.79 | 0.66 | 0.592 | 0.467 |
| $\sigma^2 (\times 10^{-5})$ | 8.61 | 8.70 | 7.53 | 1.26 | 1.02 | 0.55 |
| $\epsilon/(\text{photon} \cdot \text{min})$ | 9.54 | 12.87 | 28.75 | 49.82 | 67.71 | 148.79 |
| 效率提升(%) | 0 | 25.9 | 66.8 | 0 | 26.4 | 66.5 |

表 2 DOSXYZnrc 和 DPM 的计算比较

| 名称 | DOSRZnrc | | DPM | |
|---|-----------------|-------|-------|--------|
| | 模体 4 | 模体 5 | 模体 4 | 模体 5 |
| 模拟光子 | 3×10^8 | | | |
| t/min | 1 919 | 704 | 368.7 | 160.3 |
| 速度提升(%) | 0 | 173 | 0 | 130 |
| 1.5 cm 深度统计不确定性(%) | 0.589 | 0.593 | 1.67 | 1.69 |
| $\sigma^2 (\times 10^{-5})$ | 5.07 | 4.48 | 3.39 | 3.79 |
| $\epsilon/(\text{photon} \cdot \text{min})$ | 10.28 | 31.71 | 80.00 | 164.60 |
| 效率提升(%) | 0 | 67.6 | 0 | 51.4 |

3.3 MC 效率

本工作根据公式(1)和(2),通过编制程序遍历了野内及半影区百分剂量大于 50% D_{\max} 的所有剂量点的统计不确定性(即计算结果的标准差),计算了方差 σ^2 和效率 ϵ 。其中 MCNP4c 因计算输出量较少,仅手工计算了基于中心轴剂量的 σ^2 和 ϵ 。

表 1 给出了 DOSRZnrc 和 MCNP4c 的计算结果比较。可见,单从模拟速度提升来看, DOSRZnrc 的模体 3 较模体 2 的提升是模体 2 较模体 1 的 2 倍。而 MCNP4c 的相对比例是 3.5,这其中包含了记数栅元的减少对速度的提升影响。而从 MC 效率提升来看, DOSRZnrc 和 MCNP4c 表现出了完全的一致,即模体 3 较模体 2 的提升约是模体 2 较模体 1 的 2.5 倍。

表 2 给出了 DOSXYZnrc 和 DPM 的计算结果比较。从模拟速度来看, DPM 具有明显的优势,大约是 DOSXYZnrc 的 4—5 倍。从模体厚度对速度的影响来看,当模体厚度由 30 cm 降为 10 cm 时, DOSXYZnrc 的速度将提升 173%,而 DPM 提升 130%。相比较而言, MCNP4c 的提升(163.6%,见表 1)可以比拟,但 DOSRZnrc 的(30.1%,见表 1)的差距较远。从 MC 效率方面来讲, DPM 具有明显的优势,约是 DOSXYZnrc 的 5—8 倍。DOSRZnrc 的 MC 效率也比较高,这应与其相对较大的体元特点有关。DOSRZnrc 的体元为一系同心圆环,且随环半径增大,环体积增大,从而获得较低的统计不确定性和方差 σ^2 。MCNP4c 的 MC 效率因基于的样本不同,没有参与此比较。此外,就普遍而言,薄模体均表现出一定的 MC 效率优势。而从 MC 效率提升来看,当模体厚度由 30 cm 降为 10 cm 时, DOSXYZnrc 提升 67.6%,而 DPM 提升 51.4%,前者表现出较佳的优势。

4 讨论与结论

MC 方法是一种概率统计方法,其计算结果应同时伴随统计不确定性估计。而综合评价不同 MC 程序,需要统一的标准,为此 ICCR (International Conference on the Use of Computers in Radiation Therapy)推荐使用 Roger 等^[5]的公式计算 MC 效率。

这项研究工作基于 MCNP4c, DOSXYZnrc,

DOSRZnrc 和 DPM 考察了模体厚度变化对 MC 程序计算速度和 MC 效率的影响。发现:(1)通过改变模体的厚度,虽然可获得模拟速度的指数性提升^[3],但是不同 MC 程序速度的提升差异较大。例如,当模体厚度由 30 cm 减为 10 cm 时, DOSXYZnrc 可获得 173% 的提升, DPM 获得 130% 的提升, MCNP4c 获得 163.6% 的提升,而 DOSRZnrc 仅获得 30% 的提升。(2)模体厚度的减小,即模体后部背散射效应的缺失,仅仅会影响野外剂量的精度,不会影响野内(距底边界 0.4 cm 之外)。(3)从 MC 效率来讲, DPM 具有明显的优势,约是 DOSXYZnrc 的 5—8 倍。(4)就 4 个程序而言,薄模体均表现出一定的 MC 效率优势。(5)从 MC 效率提升角度来看, MCNP4c, DOSXYZnrc 和 DOSRZnrc 表现出一定的相似性(约 67%),而 DPM 相对低些。

此外,后经模拟研究发现,随模体厚度的变化, DOSRZnrc 表现出的统计不确定性特征和速度的异常,应归因于其内部植入的“光子强迫”方差减小技巧。在去除“光子强迫”默认选项后,对模体 1—3 进行了重新模拟,需要的时间分别为: 1 223, 996, 486 min/(1×10^8 photon); 而 1.5 cm 深度统计不确定性均约为 0.76; 方差 σ^2 分别为 1.70×10^{-5} , 1.73×10^{-5} , 1.49×10^{-5} ; MC 效率分别为 48.10, 58.04, 138.10 photon⁻¹ · min⁻¹; 模体 2 和 3 相对于模体 1 效率提升分别为 17.1% 和 65.2%。可见“光子强迫”技巧在降低体元统计不确定性的同时,也显著削弱了薄模体的速度优势。但是由于显著影响了方差,所以总体来讲,仍然提高了 DOSRZnrc 薄模体的 MC 模拟效率。

作为最精确的剂量计算方法,目前 MC 方法已广泛用于剂量计算、验证及医学物理问题的模拟研究,并出现了大量的 MC 程序。如何针对所研究的物理问题,优化选取这些 MC 程序,是 MC 程序使用者面临的若干重要实际问题之一。本工作基于 4 个 MC 程序考察了模体厚度变化对计算速度和 MC 效率的影响,以便为放射物理问题 MC 模拟工具的优化选取提供实际参考。

参考文献 (References):

[1] Wu Yican, Li Guoli, Tao Shengxiang, et al. Chinese Journal

- of Medical Physics, 2005, **22**(6): 683(in Chinese).
(吴宜灿, 李国丽, 陶声祥等. 中国医学物理学杂志. 2005, **22**(6): 683.)
- [2] Lin Hui, Wu Yican, Chen Yixue. Nuclear Physics Review, 2006, **23**(2): 237(in Chinese).
(林 辉, 吴宜灿, 陈义学. 原子核物理评论, 2006, **23**(2): 237.)
- [3] Lin Hui, Xu Liangfeng, Xu Yuanying, *et al.* Nuclear Physics Review, 2007, **24**(4): 299(in Chinese).
(林 辉, 许良凤, 徐元英等. 原子核物理评论, 2007, **24**(4): 299.)
- [4] Keall P J, Siebers J V, Jeraj R, *et al.* Med Phys, 2000, **27**: 478.
- [5] Rogers D W O, Mohan R. Questions for Comparison of Clinical MC Codes. In XIIIth International Conference on the Use of Computers in Radiation Therapy (XIIIth ICCR). In: Schlegel W, Bortfeld T (eds). Heidelberg: Springer-Verlag, 2000, 120—122.
- [6] Waltersa B R B, Kawrakow I, Rogers D W O. Medical Physics, 2002, **29**(12): 2 745.
- [7] Breisemeister J. MCNP4c— A General MC Code N-Particle Transport Code Version 4C, User's Manual LA-1309-M. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2000.
- [8] Rogers D W O, Kawrakow I, Seuntjens J P, *et al.* NRC User Codes for EGSnrc. Ottawa: Ionizing Radiation Standards National Research Council of Canada, 2005, <http://www.irs.inms.nrc.ca/>.
- [9] Sempau J, Wilderman S J, Bielajew A F. Phys Med Biol, 2000, **45**: 2 263.
- [10] Mohan R, Chui C, Lidofsky L. Med Phys, 1985, **12**: 592.

Effect of Phantom Thickness Variation on Speed and Efficiency for Different MC Codes*

LIN Hui^{1, 1)}, CHEN Dong-ying¹, WU Dong-sheng², LI Guo-li³, JING Jia^{1, 4}

(1 College of Science, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China;

2 R & D Administration Division of Science and Technology, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China;

3 School of Computer & Information, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China;

4 Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract: The effect of the phantom thickness on the simulation speed and efficiency of Monte Carlo (MC) codes, MCNP4c, DOSXYZnrc, DOSRZnrc and DPM, is investigated. The result shows that the increases of the simulation speed for different MC codes are distinct difference with decreasing the phantom thickness, in which DOSXYZnrc is the most one, and DOSRZnrc is the least one. In the viewpoint of MC efficiency, DPM and DOSRZnrc have the remarkable advantages over others; and the efficiency for the thinner phantom shows the consistent advantage over the thicker one for these MC codes. In the viewpoint of MC efficiency increase, MCNP4c, DOSXYZnrc and DOSRZnrc show the same comparability, but DPM shows relatively low characteristics. The strange characteristics of DOSRZnrc in statistical uncertainty, speed increase are further investigated to find that it is due to the photon forcing VRT (variance reduction technique) implemented in it. This VRT reduces the statistical uncertainty, but it also weakens the speed advantage of the thinner phantom. However it is due to the remarkably under estimate of the variance on the interest region, the MC efficiency of DOSRZnrc is still increasing for the thinner phantom.

Key words: Monte Carlo code; phantom thickness; calculation speed; Monte Carlo efficiency

* Received date: 7 Aug. 2007; Revised date: 7 Oct. 2007

* Foundation item: Major State Basic Research Development Program of China(2006CB708307); Science Research and Development Fund of Hefei University of Technology(071002F); Doctorial Special Sustentation Fund of Hefei University of Technology

1) E-mail: linh@ipp.ac.cn