



Etude numérique et expérimentale d'un système de planification de traitement pour la radiothérapie intégrant un calcul Monte Carlo : applications aux hétérogénéités et petits faisceaux

Bouchra Habib

► To cite this version:

Bouchra Habib. Etude numérique et expérimentale d'un système de planification de traitement pour la radiothérapie intégrant un calcul Monte Carlo : applications aux hétérogénéités et petits faisceaux. Médecine nucléaire. Université Paris Sud, 2009. Français. ⟨NNT : 2009PA112089⟩. ⟨tel-02272361⟩

HAL Id: tel-02272361

<https://hal.science/tel-02272361v1>

Submitted on 27 Aug 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization



THÈSE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE

*Ecole Doctorale « Sciences et Technologies de l'Information des
Télécommunications et des Systèmes »*

Présentée par : Bouchra HABIB

Sujet :

**ETUDE NUMERIQUE ET EXPERIMENTALE D'UN SYSTEME DE PLANIFICATION
DE TRAITEMENT POUR LA RADIOTHERAPIE INTEGRANT UN CALCUL MONTE
CARLO – APPLICATIONS AUX HETEROGENEITES ET PETITS FAISCEAUX**

Soutenue le 11 septembre 2009 devant les membres du jury :

M. A Roche, Radiologue, Professeur de l'université Paris XI, Institut Gustave Roussy, Villejuif, Président.

M. S Marcié, HDR, Chef du service de physique médicale, Centre Antoine Lacassagne, Nice, Rapporteur.

M. F Salvat, Professeur titulaire, Faculté de physique, Université de Barcelone, Rapporteur.

M. J Barthe, Professeur INSTN, Conseiller scientifique au CEA, Gif-sur-Yvette, Directeur de thèse.

M. H Kafrouni, Docteur d'état en physique médicale, PDG de la société DOSIsoft, Cachan.

Mme B Poumarède, Docteur, Chercheur au CEA, Gif-sur-Yvette.

REMERCIEMENTS

Ce mémoire est le fruit de trois années de recherche déroulées au sein du Service Systèmes et Technologies pour la Mesure (SSTM). A travers ces années, j'ai eu l'occasion de rencontrer plusieurs personnes qui ont de près ou de loin contribué à la réalisation de ce travail.

Je remercie tout d'abord Alain Pluquet, ancien chef du SSTM, pour m'avoir accueillie dans son service et permis de faire mes preuves. Merci d'avoir constamment encouragé l'activité de physique médicale.

Je souhaite également remercier Jean Barthe et Bénédicte Pommarède, directeur et encadrante de cette thèse, pour m'avoir conseillée, soutenue et accompagnée tout au long de cette thèse. Merci aussi pour le temps que vous avez consacré aux différentes étapes de ma rédaction. Je ne peux bien sûr pas oublier Olivier Gal qui m'a accompagné tout au long de ma première année de thèse. Merci pour tous les conseils que vous m'avez donnés.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Francesc Salvat, professeur à l'Université de Barcelone, pour les discussions scientifiques que nous avons pu mener et son aide précieuse au sujet du code PENFAST. Je le remercie également pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteur pour ma thèse.

Je suis également reconnaissante envers Serge Marcié, chef du Service de Physique du Centre Antoine Lacassagne, pour m'avoir ouvert les portes de son service afin d'y réaliser des mesures sur l'accélérateur Siemens Primus. Merci aussi pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteur pour ma thèse.

Je veux également remercier docteur Alain Roche, radiologue à l'IGR et professeur de l'université Paris XI, pour avoir accepté la présidence de ce jury de thèse et Hanna Kafrouni, Président Directeur Général de la société DOSIsoft, pour avoir fait partie de ce jury.

J'exprime mes sincères remerciements à Mehdi Benkebil, Eric Franchisseur et Steven Morrow de DOSIsoft pour leur collaboration afin de mener à bien la validation de la méthode de calcul de dose par Monte Carlo dans le TPS ISOgray™. Je tiens à remercier Aurélie

Isambert de l'IGR pour nous avoir accueillis afin d'y scanner les fantômes hétérogènes à l'aide du tomodensitomètre.

Mes remerciements vont également aux membres du LNHB-LMD (Laboratoire National Henri Becquerel - Laboratoire de Métrologie de la Dose), tout particulièrement à Aimé Ostrowsky pour m'avoir communiqué tous les renseignements nécessaires concernant la partie expérimentale effectuée sur l'accélérateur Saturne 43 et pour avoir répondu à mes questions. Je remercie aussi Jean-Marc Bordy, chef du LMD, pour avoir pris le temps de relire ce manuscrit et m'avoir prodigué de judicieuses remarques.

Je veux remercier tous les membres du SSTM pour leur sympathie et leur accueil. Merci à Mehdi Gmar, chef du LSVS (Laboratoire de Simulation et Validation des Systèmes), pour avoir relu ce manuscrit. Merci à Juan-Carlos Garcia-Hernandez d'avoir partagé avec moi le bureau pendant ma première année de thèse et de m'avoir aidée à résoudre les bugs informatiques. Je souhaite également remercier François Tola pour toutes les discussions enrichissantes que nous avons pu mener et ses nombreux conseils quant au sujet des codes PENELOPE et PENFAST.

Finalement et pas les moindres, j'adresse un grand merci à mes parents, ma sœur, mes deux frères et Tony qui ont su toujours m'encourager pendant les moments difficiles. Merci pour votre soutien tout au long de ces années !

...Et que veut dire travailler avec amour ?...C'est bâtir une maison avec affection, comme si votre bien-aimé devait résider dans cette maison...C'est semer le grain avec tendresse, et récolter la moisson dans la joie, comme si votre bien-aimé devait en manger le fruit...C'est insuffler dans toutes les choses que vous fabriquez l'essence de votre esprit.

Le travail est l'amour rendu visible...

Et si vous ne pouvez travailler avec amour mais seulement avec dégoût, il vaut mieux quitter votre travail et vous asseoir à la porte du temple et recevoir l'aumône de ceux qui travaillent dans la joie...Car si vous faites le pain avec indifférence, vous faites un pain amer qui n'apaise qu'à moitié la faim de l'homme...Et si vous pressez le raisin de mauvaise grâce, votre rancune distille un poison dans le vin...Et si vous chantez comme les anges, mais n'aimez pas le chant, vous voilez aux oreilles de l'homme les voix du jour et les voix de la nuit.

Khalil Gibran, *Le Prophète*.

TABLES DES MATIERES

Remerciements	3
Tables des matières	7
Abréviations	13
Introduction générale.....	15
Chapitre I	
Les méthodes Monte Carlo pour le calcul de dose en radiothérapie.....	19
1. Contexte	19
2. Evolution des méthodes de calcul de dose en radiothérapie	20
3. Pourquoi un système de planification de traitement par Monte Carlo ?	22
3.1. Précision	22
3.2. Flexibilité	25
3.3. Temps de calcul.....	25
4. Revue des méthodes de calcul de dose par Monte Carlo	26
4.1. Codes Monte Carlo généralistes.....	26
4.2. Solutions commerciales.....	26
5. Présentation du module de calcul de dose par MC utilisé dans cette étude.....	28
5.1. Méthode dite de l'espace des phases pour le calcul de dose par Monte Carlo.....	28
5.2. Description générale des deux codes MC PENELOPE et PENFAST	30
5.2.1. PENELOPE	30
5.2.2. PENFAST.....	31
5.2.3. Conclusion.....	32
5.3. Incertitudes associées aux calculs par Monte Carlo.....	33
6. Comment valider le calcul de dose dans un TPS-MC ?	34
6.1. Procédure de validation du calcul de dose par MC	34
6.1.1. Validation de la simulation du faisceau	35
6.1.2. Validation des techniques de réduction de variance	35
6.1.3. Validation des données matériaux.....	35

6.1.4.	Validation dosimétrique des modèles physiques	36
6.2.	Index gamma	36
6.3.	Critères d'acceptabilité pour la validation du calcul de dose	38
7.	Conclusions	40

Chapitre II

Accélération des codes Monte Carlo PENELOPE et PENFAST	43
1. Introduction	43
2. Parallélisation des deux codes MC PENELOPE et PENFAST	44
2.1. Principe de la parallélisation	44
2.2. Validation de la parallélisation des deux codes MC PENELOPE et PENFAST	45
2.2.1. PENELOPE	46
2.2.2. PENFAST	50
3. Techniques de réduction de variance dans PENELOPE	52
3.1. Principe des techniques de réduction de variance	52
3.1.1. « Splitting » du rayonnement de freinage	53
3.1.2. « Splitting » et roulette russe angulaires	54
3.1.3. « Splitting » circulaire	55
3.1.4. Autres symétries de la tête de l'accélérateur	55
3.2. Efficacité d'une simulation	55
3.3. Evaluation du gain en efficacité de simulation	57
3.4. Validation des techniques de réduction de variance	61
4. Utilisation de la technique du « splitting » en aval du PSF pour le calcul des distributions de dose avec PENFAST	63
5. Conclusions	65

Chapitre III

Mise au point d'une nouvelle méthode de représentation du spectre en énergie des électrons primaires d'un accélérateur linéaire		67
1.	Introduction	67
2.	Etat de l'art	68
2.1.	Sensibilité des distributions de dose aux paramètres de la source	68
2.1.1.	Energie moyenne.....	68
2.1.2.	Distribution en énergie	69
2.1.3.	Distribution spatiale	69

2.1.4.	Distribution angulaire.....	70
2.2.	Sensibilité des distributions de dose aux détails géométriques de la tête de l'accélérateur	70
2.3.	Conclusion.....	71
3.	Simulation MC des faisceaux issus des accélérateurs linéaires	72
3.1.	Méthode d'ajustement du spectre initial en énergie d'un accélérateur linéaire ...	72
3.2.	Détermination de la taille de la source d'électrons primaires	75
4.	Application aux faisceaux issus de l'accélérateur linéaire Saturne 43.....	77
4.1.	Paramètres de simulation	78
4.2.	Mesures expérimentales	79
4.3.	Mode électron 18 MeV	80
4.3.1.	Spectre en énergie des électrons primaires.....	80
4.3.2.	Spectre en énergie à l'entrée du fantôme	81
4.3.3.	Distributions de dose.....	83
4.3.4.	Comparaison aux résultats d'une distribution en énergie gaussienne.....	85
4.4.	Mode photon 12 MV	87
4.4.1.	Spectre en énergie des électrons primaires.....	87
4.4.2.	Spectre en énergie à l'entrée du fantôme	89
4.4.3.	Distributions de dose.....	89
4.5.	Conclusion.....	92
5.	Application aux faisceaux issus de l'accélérateur linéaire Primus de Siemens	92
5.1.	Paramètres de simulation	93
5.2.	Mesures expérimentales	94
5.3.	Mode électron 9 MeV	95
5.3.1.	Spectre en énergie des électrons primaires.....	95
5.3.2.	Spectre en énergie à l'entrée du fantôme	96
5.3.3.	Distributions de dose.....	97
5.4.	Mode photon 25 MV	102
5.4.1.	Spectre en énergie des électrons primaires.....	102
5.4.2.	Spectre en énergie à l'entrée du fantôme	103
5.4.3.	Distributions de dose.....	104
5.5.	Conclusion.....	110
6.	Conclusions	111

Chapitre IV

Validation du calcul de dose avec le code Monte Carlo PENFAST en conditions métrologiques..... 113

1. Introduction	113
2. Matériels et méthodes.....	114
2.1. Fantômes hétérogènes utilisés	114
2.2. Mesures expérimentales	116
2.2.1. Mesures en milieu homogène.....	116
2.2.2. Mesures en milieux hétérogènes	117
2.3. Simulations Monte Carlo	118
3. Résultats et discussions	119
3.1. Influence de la composition du matériau sur la dose calculée : Ajout de matériau dans le code Monte Carlo PENFAST	119
3.2. Comparaisons des distributions de dose.....	122
3.2.1. Milieu homogène.....	122
3.2.2. Milieux hétérogènes	126
3.3. Comparaison du temps de calcul entre PENELOPE et PENFAST	131
4. Conclusions	132

Chapitre V

Evaluation du système de planification de traitement par Monte Carlo en conditions cliniques..... 135

1. Introduction	135
2. Matériels et méthodes.....	136
2.1. Fantômes utilisés	136
2.2. Mesures expérimentales	136
2.3. Simulations Monte Carlo	137
3. Résultats et discussions	138
3.1. Comparaison entre les calculs MC effectués avec des images TDM et des fantômes numériques.....	138
3.1.1. Mode électron 9 MeV	138
3.1.2. Mode photon 25 MV	141
3.2. Comparaison entre les mesures et les calculs MC	143
3.2.1. Mode électron 9 MeV	143

3.2.2. Mode photon 25 MV	148
4. Evaluation de l'intérêt de l'ajout de nouveaux matériaux dans le TPS-MC	150
5. Conclusions	154
Conclusion générale et perspectives	155
Références bibliographiques	161
Annexe A : Le code Monte Carlo PENELOPE	171
Annexe B : Caractéristiques de la parallélisation des codes Monte Carlo PENELOPE et PENFAST via l'interface MPI	183
Annexe C : Méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité.....	187
Annexe D : Modélisation géométrique de la tête des accélérateurs linéaires	189
Liste des publications et communications personnelles.....	197
Resumé	201
Abstract	201

ABRÉVIATIONS

AAPM: American Association of Physicists in Medicine

BMI: Bending Magnet Intensity

CAL: Centre Antoine Lacassagne

CI: Chambres d'Ionisation

CIRS: Computerized Imaging Reference Systems Incorporated

DTA: Distance To Agreement

EDR: Extended Dose Range

ESTRO: European Society for Therapeutic Radiology and Oncology

IAEA: International Atomic Energy Agency

ICRU: International Commission on Radiation Units and measurements

IRM: Imagerie par Résonance Magnétique

LNHB: Laboratoire National Henri Becquerel

Lsqnonneg: Least Squares with NONNEGativity constraints

MAESTRO: Methods and Advanced Equipment for Simulation and Treatment in Radio Oncology

MC: Monte Carlo

MPI: Message Passing Interface

MU: Monitor Unit (acronyme anglais pour unité moniteur)

NCS: Netherlands Commission on Radiation Dosimetry

OAR: Organe À Risque

PDD_{20,10}: Percent Depth Doses 20/10

PENELOPE: PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons

PMMA: PolyMethyl MethAcrylate

PSF: Phase Space File

RCMI: Radiothérapie Conformationnelle avec Modulation d'Intensité

SFPM: Société Française de Physique Médicale

TDM: Tomodensitométrie

TELEDOS: TELE-service pour le calcul DOSimétrique

TEP: Tomographie par Emission de Positons

TERMA: Total Energy Released per unit MAss

TPR_{20,10}: Tissue Phantom Ratio 20/10

TPS: Treatment Planning System

UH: Unité Hounsfield

INTRODUCTION GENERALE

A l'heure actuelle, la radiothérapie externe reste l'une des techniques les plus employées pour le traitement du cancer. Les chances de guérison sont d'autant plus grandes que la dose de rayonnement ionisant délivrée est élevée et conforme à la tumeur. Par contre une dose trop importante, reçue par les organes à risque¹ (OAR) et plus généralement les tissus sains, peut produire des complications et des séquelles irréversibles. Un compromis est alors établi, limitant la chance de guérison.

Les évolutions des techniques du traitement en radiothérapie, observées ces dernières années, comme la radiothérapie conformationnelle avec modulation d'intensité (RCMI), permettent d'adapter la forme du volume traité à celle de la tumeur en déposant la dose prescrite tout en protégeant convenablement les OAR environnants. Ces nouvelles techniques nécessitent une précision élevée dans les différentes étapes du plan de traitement des patients. Tout traitement par radiothérapie externe nécessite en effet une préparation (ou planification) qui se déroule en trois étapes principales. La première utilise l'imagerie numérique pour la modélisation géométrique tridimensionnelle du patient et le contourage du volume cible (la tumeur) et des OAR à protéger en priorité lors de l'irradiation. La deuxième étape établit la balistique d'irradiation en définissant un ou plusieurs faisceaux, avec ou sans accessoires (filtres en coin, collimateurs multilames, etc.). La troisième étape concerne le calcul prévisionnel de la distribution de dose dans le patient et la détermination du temps d'irradiation nécessaire pour délivrer la dose prescrite par le médecin. La décision pour la réalisation du traitement planifié est prise suite à cette dernière étape.

Compte tenu de son rôle déterminant, la plus grande précision possible sur la dose calculée est indispensable pour garantir un traitement efficace. Les systèmes de planification du traitement (Treatment Planning System ou TPS, en anglais) disponibles actuellement, utilisent des méthodes analytiques de calcul de dose rapides mais parfois imprécises, notamment lorsque la tumeur est située dans des zones hétérogènes. Une solution est alors de recourir aux méthodes Monte Carlo (MC) de calcul statistique, aptes à donner des résultats très proches de la réalité

¹ Les organes à risque sont les organes sains, périphériques à la tumeur, susceptibles de développer des effets tardifs suite aux irradiations.

parce qu'elles reproduisent la physique de l'interaction des rayonnements avec la matière. La contrepartie de cette précision, est un temps de calcul très long, rendant jusqu'à aujourd'hui ces méthodes inutilisables en situation clinique.

Récemment, un nouveau code de calcul de dose, nommé PENFAST, a été développé dans le cadre du projet européen MAESTRO (LSHC-CT-2004-503564) en se basant sur le même modèle physique du code MC généraliste PENELOPE. PENFAST permet une simulation rapide de la dose absorbée dans des géométries voxélisées² issues des images tomodensitométriques (TDM). Dans la même perspective, d'autres travaux dans le cadre du projet TELEDOS (convention ANR05RNTS01301) ont porté sur l'utilisation clinique du code MC PENELOPE et de sa version accélérée PENFAST en les déployant sur un « cluster » de calcul. Ce travail de thèse, porte sur la validation des différentes améliorations introduites dans ces deux codes en vue de leur accélération (techniques de réduction de variance et parallélisation) ainsi que l'évaluation de leurs performances techniques (gain en temps de calcul) et dosimétriques (précision sur la dose calculée), indispensables avant toute utilisation clinique.

Le premier chapitre présente le contexte de cette étude et décrit les avantages des méthodes MC de calcul de dose par rapport aux méthodes conventionnelles actuellement utilisées dans les TPS. Ce chapitre fait également une revue des méthodes existantes du calcul de dose par MC. Il décrit les deux codes MC PENELOPE et PENFAST, utilisés dans cette étude, ainsi que leur rôle en dosimétrie pour la radiothérapie. Enfin, il définit la procédure de validation d'un outil de calcul de dose par MC avant son utilisation en routine clinique.

Le deuxième chapitre expose les méthodes introduites dans ces deux codes pour réduire le temps de calcul. Il s'agit de leur parallélisation afin de partager le calcul sur plusieurs processeurs et de l'utilisation de techniques de réduction de variance implémentées dans le code PENELOPE. Ce chapitre présente également les résultats des tests de validation de ces méthodes. L'optimisation des techniques de réduction de variance afin d'obtenir le meilleur gain en performance est aussi décrite.

² Un voxel est l'entité volumique élémentaire qui permet de définir un volume. Les voxels sont généralement de forme parallélépipédique.

Après un bref aperçu des travaux antérieurs sur la simulation MC des accélérateurs linéaires, le troisième chapitre décrit une nouvelle méthode mise au point pour la représentation du spectre en énergie des électrons primaires. Ce développement est fondé sur l'utilisation des simulations MC avec PENELOPE et le principe de l'ajustement par la méthode des moindres carrés. La validation de cette nouvelle méthode, appliquée à la simulation des faisceaux de différentes tailles issus des accélérateurs Saturne 43 (photon 12 MV et électron 18 MeV) et Primus de Siemens (photon 25 MV et électron 9 MeV), est également présentée.

Le quatrième chapitre aborde la validation dosimétrique du code MC PENFAST. Un faisceau de photons 12 MV et un faisceau d'électrons 18 MeV, issus de l'accélérateur linéaire Saturne 43 installé au Laboratoire National Henri Becquerel (LNHB), ont été utilisés. Cette validation a été réalisée, en premier lieu dans un milieu homogène, puis en second lieu dans des fantômes hétérogènes numériques de caractéristiques réelles. Dans cette étude, un nouveau matériau a été ajouté dans la base de données de PENFAST afin de générer des géométries voxélisées de caractéristiques identiques à celles de la géométrie réelle. Les conséquences dosimétriques de cet ajout sont argumentées dans ce chapitre. Les distributions de dose calculées avec PENFAST ont été comparées à celles calculées avec PENELOPE ainsi qu'à celles obtenues expérimentalement. Le gain en temps de calcul obtenu avec PENFAST par rapport à PENELOPE a été également évalué.

Le dernier chapitre est consacré à l'évaluation, en conditions cliniques, du TPS ISOgray™ (de la société française DOSIsoft), dans lequel la méthode de calcul de dose par MC PENFAST est implémentée. Les images TDM des fantômes hétérogènes ont été utilisées en vue d'une évaluation de la conversion des unités Hounsfield (UH) en données de simulation (matériau et masse volumique requis pour chaque voxel de la géométrie). Cette étude a été réalisée pour le mode photon 25 MV et le mode électron 9 MeV issus de l'accélérateur linéaire Primus installé au Centre Antoine Lacassagne (CAL) à Nice. Une attention toute particulière a été portée sur les champs de taille réduite³ de plus en plus utilisés avec le développement de la RCMI. En effet, dans certaines situations, les petits champs entraînent un manque d'équilibre électronique qui aboutit à des erreurs de calcul de dose avec les méthodes conventionnelles.

³ Des champs de taille inférieures à 10×10 cm² mais supérieure à 3×3 cm² ont été étudiés. En effet, il n'existe pas actuellement de références métrologiques pour des champs de taille très réduite. Dans le contexte d'une validation de la physique d'un code de calcul de dose, il est préférable d'avoir une mesure de dose précise.

Les distributions de dose obtenues par le TPS à partir des images TDM ont été comparées à celles calculées à partir des fantômes numériques ainsi qu'à celles mesurées par des films radiographiques. L'intérêt de l'ajout de nouveaux matériaux couramment rencontrés en radiothérapie dans la base de données du TPS est également présenté dans ce chapitre.

Chapitre I

LES METHODES MONTE CARLO POUR LE CALCUL DE DOSE EN RADIOTHERAPIE

1. Contexte

Aujourd'hui, la radiothérapie est l'un des traitements les plus fréquents en cancérologie. Plus de la moitié des cancers est traitée par cette technique (en combinaison avec la chirurgie et/ou la chimiothérapie) et presque 50 % des guérisons le doivent en partie ou en totalité à la radiothérapie. Le principe de cette technique est d'utiliser les rayonnements pour détruire les cellules cancéreuses tout en épargnant le mieux possible les tissus sains avoisinants la tumeur. Pour ce faire, l'irradiation peut être appliquée de plusieurs manières telles que :

- La curiethérapie : implantation des sources radioactives scellées dans la tumeur ou à son contact.
- La radiothérapie métabolique : injection d'une molécule radio-marquée, non-scellée qui va se fixer sur les cibles tumorales.
- La radiothérapie externe : la source radioactive est à l'extérieur du patient ; les faisceaux de rayonnements atteignant la tumeur en traversant les tissus sains.

C'est cette dernière méthode qui est utilisée dans le cadre de cette étude. Ses origines remontent au XIX^{ème} siècle, après la découverte des rayons X par Röntgen en 1895. La sophistication des appareils de radiothérapie (accélérateurs linéaires à collimateur multilames) et le développement des moyens informatiques ont entraîné, pendant les dernières décennies, une évolution des techniques de traitement (comme la RCMI) et des TPS en radiothérapie externe.

De nos jours, la planification du traitement en radiothérapie externe se déroule en plusieurs étapes (AAPM 1998). Elle commence par l'acquisition des données anatomiques en trois dimensions du patient (à l'aide de la TDM, l'imagerie par résonance magnétique IRM et/ou la tomographie par émission de positons TEP) qui seront utilisées pour délimiter le volume cible, à traiter, et les OAR, à protéger, lors de l'irradiation. Une fois ces volumes définis, les

faisceaux de rayonnements adaptés (type, énergie, nombre, incidences, dimensions et accessoires) sont choisis de façon à maximiser la dose reçue dans le volume cible et à minimiser celle reçue dans les OAR. Ensuite, le calcul prévisionnel de la distribution des doses en trois dimensions autour du volume tumoral est réalisé. Le temps d'irradiation (par faisceau et par séance) nécessaire pour délivrer la dose prescrite par le médecin est également déterminé. Cette dernière étape est très importante sachant qu'une sur-irradiation peut être la cause de cancers secondaires dans les tissus sains, et qu'une sous-irradiation ne détruira pas en totalité les cellules cancéreuses. Les algorithmes de calcul de dose doivent ainsi permettre un calcul précis de la dose absorbée dans les tissus en un temps raisonnable compatible avec la routine clinique.

L'erreur globale sur la dose délivrée est l'accumulation des erreurs inhérentes à chacune des étapes du traitement (contourage du volume cible et des zones saines avoisinantes, calcul de la dose délivrée, réglage des faisceaux et mouvements du patient). Papanikolaou *et al.* 2004 ont bien confirmé que des effets cliniques sont observables à partir d'une sur-irradiation de 7 % par rapport à la dose prescrite. Il est donc couramment admis que pour garantir l'efficacité d'un traitement, l'erreur globale maximale sur la dose délivrée, en tout point du volume cible, doit rester inférieure à 5 % (ICRU 1978, Mijnheer *et al.* 1989). En conséquence, l'erreur sur le calcul prévisionnel de la dose dans le TPS ne doit pas dépasser 3 % (ICRU 1978, Mijnheer *et al.* 1989, Ahnesjö et Aspradakis 1999, Fraas *et al.* 2003).

Ce travail de thèse a pour objectif d'évaluer les performances d'un nouvel algorithme de calcul de dose par MC intégré dans le TPS ISOgray™ de la société française DOSIsoft. Alors que les codes MC généralistes demandent des temps de calcul longs, ce TPS utilise un algorithme rapide de calcul de dose par MC. Il est alors indispensable de s'assurer de sa précision avant son utilisation clinique.

2. Evolution des méthodes de calcul de dose en radiothérapie

Comme nous l'avons mentionné précédemment, l'évaluation de la dose délivrée durant l'irradiation est une étape cruciale lors de la planification du traitement en radiothérapie. Au départ, les premiers plans de traitement se sont fondés sur des méthodes empiriques ou analytiques en utilisant une description simplifiée de l'anatomie du patient. Ces dernières décennies, la sophistication des algorithmes de calcul de dose implémentés dans les TPS s'est accrue grâce à l'amélioration de la puissance de calcul des ordinateurs et l'apparition de

nouveaux outils pour l'imagerie médicale, tels que la TDM au début des années 1970, et plus récemment, l'IRM et la TEP. Cette évolution des algorithmes de calcul de dose, allant de la simple correction des hétérogénéités aux algorithmes de convolution/superposition, a permis d'améliorer la précision sur la dose délivrée au patient.

Pour la RCMI, les méthodes les plus précises mises en œuvre actuellement dans les TPS sont les méthodes de convolution/superposition (Mackie *et al.* 1985, Ahnesjö et Mackie 1987, Ahnesjö 1989, Keall et Hoban 1996, Ahnesjö et Aspradakis 1999). Ces méthodes sont fondées sur une convolution de l'énergie totale libérée par unité de masse (Total Energy Released per unit MAss ou TERMA), qui est analytiquement déterminée, avec des « kernels » de dépôt d'énergie pré-calculés par des méthodes MC pour différents milieux homogènes.

A la fin des années 90, des TPS offrant des options de calcul de dose par MC (TPS-MC) sont apparus. La simulation MC est une méthode statistique capable de prendre en compte toute la physique connue des interactions des rayonnements avec la matière. Selon le principe de la méthode MC, le phénomène de transport de la particule est fondé sur la simulation d'une succession d'interactions microscopiques (appelées aussi « événements ») reproduisant le parcours de la particule réelle. La succession des interactions subies par une particule depuis sa création jusqu'à son absorption totale dans le milieu est appelée « histoire ». La trajectoire de chaque particule est simulée, individuellement, en tirant au hasard à l'aide d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires¹ les paramètres physiques des interactions (le libre parcours moyen entre deux événements, le type d'interaction, l'énergie perdue et la déflexion angulaire, la direction et l'énergie de la particule secondaire créée, etc.), selon des distributions de probabilité qui décrivent les processus physiques mis en jeu. Ces distributions de probabilité sont déterminées à partir des différentes sections efficaces des interactions qui sont propres au type et à l'énergie de la particule incidente ainsi qu'à la nature du matériau avec lequel elle interagit. Après la simulation d'un grand nombre d'histoires, la valeur d'une grandeur d'intérêt macroscopique (fluence, dose absorbée, etc.) est obtenue à partir de la moyenne statistique des grandeurs calculées, affectée d'une incertitude statistique. A l'aide du théorème de la limite centrale, on montre que, pour un nombre d'histoire très grand, l'incertitude statistique associée à la grandeur calculée est proportionnelle à l'inverse de la

¹ On parle ici de nombres pseudo-aléatoires parce qu'ils sont générés par un algorithme mathématique possédant une période très grande mais néanmoins finie.

racine carré du nombre d'histoires. Le nombre d'histoires est ainsi choisi en fonction de la précision recherchée.

A ce jour, dans le cadre de la physique médicale, la méthode MC est décrite comme étant la plus précise pour calculer la dose absorbée parce qu'elle prend en compte la physique des particules (Andreo 1991, Rogers et Bielajew 1990, Mackie 1990, Ma et Jiang 1999, Verhaegen et Seuntjens 2003, Reynaert *et al.* 2007). Cependant, son temps d'exécution reste beaucoup trop long pour une utilisation en pratique clinique. Des simplifications et des méthodes pour accélérer les calculs sont donc nécessaires.

3. Pourquoi un système de planification de traitement par Monte Carlo ?

Les méthodes MC occuperont, dans les prochaines années, une place privilégiée au sein des outils de planification de traitement en radiothérapie (Mohan 1997, Ma et Jiang 1999, Mohan *et al.* 2001, Verhaegen et Seuntjens 2003, Reynaert *et al.* 2007) pour plusieurs raisons.

3.1. Précision

Au niveau de la précision, les méthodes MC se démarquent par la prise en compte de façon quasi-complète de la physique de l'interaction rayonnement - matière. Cette caractéristique les distingue des autres méthodes et leur permet d'être les plus précises. De ce fait, les TPS-MC ont la capacité de répondre facilement au critère de tolérance de 3 % sur la dose calculée (qui mène à une précision globale de 5 %). En effet, la précision sur la dose calculée par MC dépend de plusieurs paramètres :

- La simulation du faisceau qui dépend de la caractérisation de la source initiale d'électrons primaires et de la modélisation géométrique de la tête d'irradiation.
- Les sections efficaces utilisées dans le code MC qui elles aussi sont entachées d'une incertitude introduisant une erreur dans le calcul de dose.
- L'incertitude statistique associée à la dose calculée en raison du nombre forcément limité d'histoires simulées.
- Les données de matériaux qui dépendent de la conversion des données de l'image TDM (UH) en données de simulation MC (composition atomique et masse volumique pour chaque voxel de la géométrie).

Premièrement, il est possible d'avoir une précision meilleure que 1 % sur la simulation du faisceau (cf. Chapitre III) en respectant les caractéristiques géométriques des éléments

constituant la tête de l'accélérateur linéaire et en optimisant les paramètres du faisceau d'électrons primaires (distributions énergétique, spatiale et angulaire).

Deuxièmement, les conséquences de l'incertitude sur les sections efficaces utilisées dans le code MC est supposée par la plupart des auteurs comme étant suffisamment faible pour être négligeable (Fraass *et al.* 2003, Salvat *et al.* 2006).

Troisièmement, l'incertitude statistique associée à la dose calculée dépend du nombre d'histoires simulées. Par conséquent, en simulant un très grand nombre d'histoires, il est possible de réduire cette incertitude à une valeur inférieure à 1 % (1σ) (Verhaegen et Seuntjens 2003, Ma et Jiang 1999, Reynaert *et al.* 2007).

En dernier lieu, la caractérisation des tissus ajoute aussi une erreur sur la dose difficile à quantifier (du Plessis *et al.* 1998, Schneider *et al.* 2000, Verhaegen et Devic 2005, Vanderstraeten *et al.* 2007, Isambert 2009). Par exemple, au lieu d'utiliser l'eau avec différentes masses volumiques pour les différents types de tissu, ce qui semble arbitraire, la composition réelle du tissu doit être définie pour obtenir un calcul précis de la dose absorbée (cf. Chapitres IV et V).

Prenant en compte tous les facteurs mentionnés ci-dessus, les TPS-MC sont capables de proposer un calcul de dose avec une marge d'erreur tout à fait en conformité avec le critère de 3 % exigé pour une radiothérapie de qualité.

La valeur supplémentaire des méthodes MC comparées aux méthodes conventionnelles de calcul de dose (semi-empiriques et analytiques) a été clairement démontrée par plusieurs études antérieures. Il a été démontré dans ces études que les méthodes conventionnelles ne font pas toujours preuve d'une grande fiabilité dans des situations complexes telles que la présence d'hétérogénéités ou le manque de volume diffusant, et que dans ces situations, le calcul de dose par MC est toujours plus précis (Mohan 1997, Solberg *et al.* 1998, Ma *et al.* 1999, Mohan *et al.* 2001, Martens *et al.* 2002b, Carrasco *et al.* 2004, Heath *et al.* 2004, Krieger et Sauer 2005, Paelinck *et al.* 2005).

Par exemple, Mohan (1997) a déclaré que les méthodes conventionnelles (y compris les méthodes de convolution/superposition) entraînent des erreurs de 5 à 10 % sur la dose absorbée en présence d'hétérogénéités.

Les résultats de Ma *et al.* (1999) ont montré que pour les faisceaux d'électrons, l'algorithme conventionnel de calcul de dose Pencil Beam (TPS FOCUS) donne des erreurs allant jusqu'à 15 % (écart en dose locale) et 1 cm (décalage en position pour une même dose) conduisant à des doses plus élevées dans les OAR. En RCMI, de grandes différences ont été mises en

évidence entre le TPS FOCUS et les mesures expérimentales en présence d'hétérogénéités os et/ou poumon, même en utilisant l'algorithme de superposition/convolution. Ma *et al.* (1999) ont démontré que les méthodes MC sont certainement intéressantes dans ces situations.

Plus récemment, Paelinck *et al.* (2005) ont effectué une comparaison entre deux algorithmes de convolution/superposition et les méthodes MC pour des hétérogénéités de faible densité. Il ressort de cette étude que l'algorithme de convolution/superposition du TPS Helax TMS (Nucletron) sous-estime la dose dans la cavité équivalent-poumon de 6 %, et celui du TPS Pinnacle (Philips) surestime la dose derrière la cavité de 4 %, alors que les résultats de la simulation MC sont en bon accord avec les mesures.

Une autre comparaison intéressante entre l'algorithme Pencil Beam (TPS Helax TMS), l'algorithme de superposition/convolution Collapsed Cone (TPS Helax TMS), la méthode MC (XVMC) et les mesures expérimentales, a été effectuée par Krieger et Sauer (2005) pour un fantôme constitué de plaques de polystyrène et d'un matériau équivalent-poumon. Dans le polystyrène, l'algorithme de superposition/convolution et la simulation MC étaient en bon accord avec les mesures alors que l'algorithme Pencil Beam déviait de 12 %. Dans le matériau équivalent-poumon de faible densité, l'algorithme de superposition/convolution déviait aussi de plus de 8 % par rapport aux mesures et aux résultats de MC comme illustré dans la Figure 1.

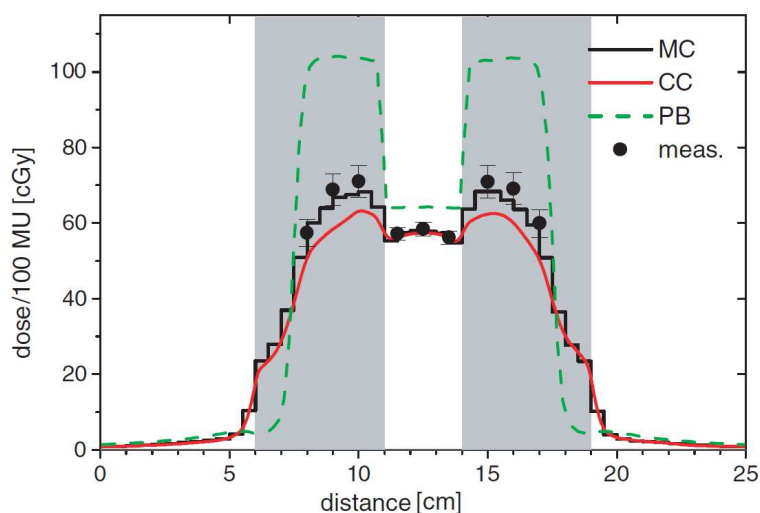


Figure 1 : Comparaison des profils de dose calculés avec l'algorithme Pencil Beam (PB), l'algorithme de convolution/superposition Collapsed Cone (CC), la simulation MC et les mesures expérimentales (meas.) dans un fantôme constitué de plaques de polystyrène et d'un matériau équivalent-poumon. Cas d'un faisceau de photons de 6 MV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, de l'accélérateur Primus (Siemens). La dose est exprimée en cGy par 100 unités Moniteur ou Monitor units (MU) de l'accélérateur. D'après Krieger et Sauer (2005).

D'autres auteurs ont comparé les méthodes de superposition/convolution avec les méthodes MC pour des cas cliniques tels que les traitements tête-cou, sein, médiastin et RCMI de la prostate (Francescon *et al.* 2000, Laub *et al.* 2001, Leal *et al.* 2003, Chetty *et al.* 2005, Yang *et al.* 2005). Ils ont conclu que pour ces situations complexes, il serait avantageux de faire appel à la simulation MC pour augmenter la précision sur la dose calculée. En effet, les méthodes de superposition/convolution corrigent les inhomogénéités en utilisant une densité effective déterminée par le parcours moyen du rayonnement. Ce type de correction n'est pas idéal et engendre des erreurs dosimétriques au voisinage des interfaces avec les hétérogénéités (Ahnesjö 1989, Woo et Cunningham 1990, Ahnesjö et Aspradakis 1999).

3.2. Flexibilité

Un autre avantage de la simulation MC est sa grande flexibilité. En effet, en appliquant le principe de la simulation MC au transport des particules, il est possible d'extraire des données sur toutes les grandeurs utilisées dans la simulation. Par exemple, il est possible d'obtenir des spectres angulaires ou énergétiques des particules de la source (Mohan *et al.* 1985, Sheikh-Bagheri et Rogers 2002b) ou encore d'étudier la réponse d'un détecteur comme la chambre à ionisation (Kawrakow 2000a, McCaffrey *et al.* 2004). Ce type de données est souvent difficile ou impossible à obtenir à partir des mesures expérimentales.

La simulation MC est aussi utile, par exemple, pour calculer les doses absorbées hors-champs ou encore les doses dues aux neutrons produits par l'accélérateur.

3.3. Temps de calcul

Le principal inconvénient des méthodes MC est lié à leur temps d'exécution, plus long que celui des méthodes conventionnelles de calcul de dose, à cause du suivi individuel du transport des particules de la tête de l'accélérateur jusqu'au patient. En effet, la simulation MC de grande précision du transport des particules dans la tête d'un accélérateur linéaire et du dépôt de dose dans le patient peut prendre plusieurs jours, alors que les temps acceptables en routine clinique sont de l'ordre de 10 minutes.

Il existe cependant des solutions pour remédier à ce problème, à savoir la division de la simulation en plusieurs étapes, la parallélisation du calcul sur plusieurs processeurs et l'utilisation de techniques de réduction de variance. Différents auteurs (Kawrakow et Fippel 2000, Mohan *et al.* 2001, Reynaert *et al.* 2007, Poumarède *et al.* 2008) considèrent que ces

méthodes de réduction du temps de calcul bien utilisées n'introduisent aucun biais sur les résultats du calcul. Nous sommes arrivés à cette même conclusion en étudiant l'effet de la parallélisation et des techniques de réduction de variance sur les résultats de la simulation MC avec PENELOPE. Les résultats sont présentés dans le Chapitre II.

4. Revue des méthodes de calcul de dose par Monte Carlo

Il est aujourd'hui convenu que les limitations des méthodes conventionnelles dans la planification des traitements en radiothérapie doivent être comblées en utilisant les méthodes MC. Cependant, l'utilisation de ces dernières a longtemps été limitée au domaine de la recherche, à un rôle de contrôle ou de validation en raison du temps de calcul, de plusieurs jours voire plusieurs semaines, nécessaire pour produire un résultat avec une incertitude statistique acceptable.

4.1. Codes Monte Carlo généralistes

Les codes MC généralistes, spécifiques à la recherche, offrent la particularité de posséder de grandes capacités dans la description de la géométrie ainsi que dans la simulation du transport des rayonnements. Ces codes ont par contre l'inconvénient d'être lents.

Parmi les principaux codes MC généralistes, on peut citer : EGS (Nelson *et al.* 1985, Kawrakow et Rogers 2000), GEANT (Ford et Nelson 1978, Agostinelli 2003), MCNP (Briesmeister 1993, Brown 2003) et PENELOPE (Baró *et al.* 1995 ; Salvat *et al.* 1996, 2001, 2006 ; Sempau *et al.* 1997).

En général, la simulation du transport des photons est pratiquement identique dans les quatre codes mentionnés pour la gamme d'énergie utilisée en radiothérapie, bien que les sections efficaces utilisées soient différentes. En revanche, la différence principale figure dans la simulation du transport des électrons. Cette différence a une grande influence sur la vitesse et la précision du code (Verhaegen et Seuntjens 2003).

4.2. Solutions commerciales

Aujourd'hui, les méthodes MC commencent à être intégrées au sein de quelques TPS commerciaux. Ces nouveaux codes ont comme principales caractéristiques d'être beaucoup plus rapides que les codes MC généralistes et d'être applicables à des cas réels (fondés sur des images TDM anatomiques du patient). Les premiers TPS-MC ont été commercialisés en 2002 par la société Nucletron pour les faisceaux d'électrons (Cygler *et al.* 2004) et par la société

NOMOS (Sewickley, Pennsylvania) pour les photons (Hartman Siantar *et al.* 1997, 2001) suivi par Varian (Popple *et al.* 2006), Philips (Fragoso *et al.* 2008), Elekta-CMS, DOSIsoft (Habib *et al.* 2009) et BrainLab. Le Tableau 1 détaille, pour les différents industriels, le type d'algorithme faisant appel aux méthodes MC (Reynaert *et al.* 2007).

Tableau 1 : Revue des TPS commerciaux mettant en œuvre les méthodes MC.

Constructeur	Produit	Code MC
NOMOS Corporation	Corvus	PEREGRINE
BrainLab	iPlan RT Dose	XVMC
Elekta-CMS	XiO	XVMC
	Monaco	XVMC
DOSIsoft	ISOgray	PENELOPE / PENFAST
Nucletron	DCM	VMC++
	OTP	VMC++
Philips	Pinnacle	DPM / MCV
Varian	Eclipse	MMC

On distingue les codes PEREGRINE, Voxel Monte Carlo (VMC/XVMC/VMC++) (Kawrakow *et al.* 1996, Fippel 1999, Kawrakow 2000b), Macro-Monte Carlo (MMC) (Neuenschwander et Born 1992), Dose Planning Method (DPM) (Sempau *et al.* 2000), Monte Carlo Vista (MCV) (Siebers *et al.* 2000) et PENELOPE/PENFAST (Salvat *et al.* 2006, en prep ; Salvat 2008a et b).

Pour être suffisamment rapides, ces codes ont dû être adaptés à toutes les spécifications du traitement en radiothérapie (gamme d'énergie limitée, structure simple et compositions atomiques limitées dans les images TDM) et de ce fait, présentent beaucoup de compromis. Ces compromis, qui permettent d'augmenter la vitesse d'exécution, portent généralement sur l'optimisation d'algorithmes dédiés de transport des rayonnements ainsi que l'utilisation de techniques de réduction de variance et de données pré-calculées.

Une revue complète de la littérature sur les simulations MC en radiothérapie est disponible dans Verhaegen et Seuntjens (2003), Chetty *et al.* (2007), Reynaert *et al.* (2007).

Parmi les travaux de recherche en cours, le projet européen MAESTRO et le projet ANR TELEDOS portent sur l'utilisation clinique du code MC PENELOPE et de sa version accélérée PENFAST en les implémentant dans le TPS ISOgray™ (DOSIsoft) et en les déployant sur un « cluster » de calcul. Ce travail de thèse porte sur l'optimisation et la

validation des différentes améliorations introduites dans ces deux codes en vue de leur accélération (techniques de réduction de variance et parallélisation) ainsi que l'évaluation de leurs performances techniques (gain en temps de calcul) et dosimétriques (précision sur la dose estimée).

5. Présentation du module de calcul de dose par MC utilisé dans cette étude

5.1. Méthode dite de l'espace des phases pour le calcul de dose par Monte Carlo

Le module du calcul de dose utilisant les deux codes MC PENELOPE et PENFAST est fondé sur la méthode dite de l'espace des phases, méthode pertinente pour réduire le temps de calcul en clinique. La simulation qui part de la tête de l'accélérateur pour aboutir au calcul de la dose dans le patient peut être ainsi séparée en deux à trois étapes de calcul (Figure 2) suivant que l'on est en mode électron ou en mode photon.

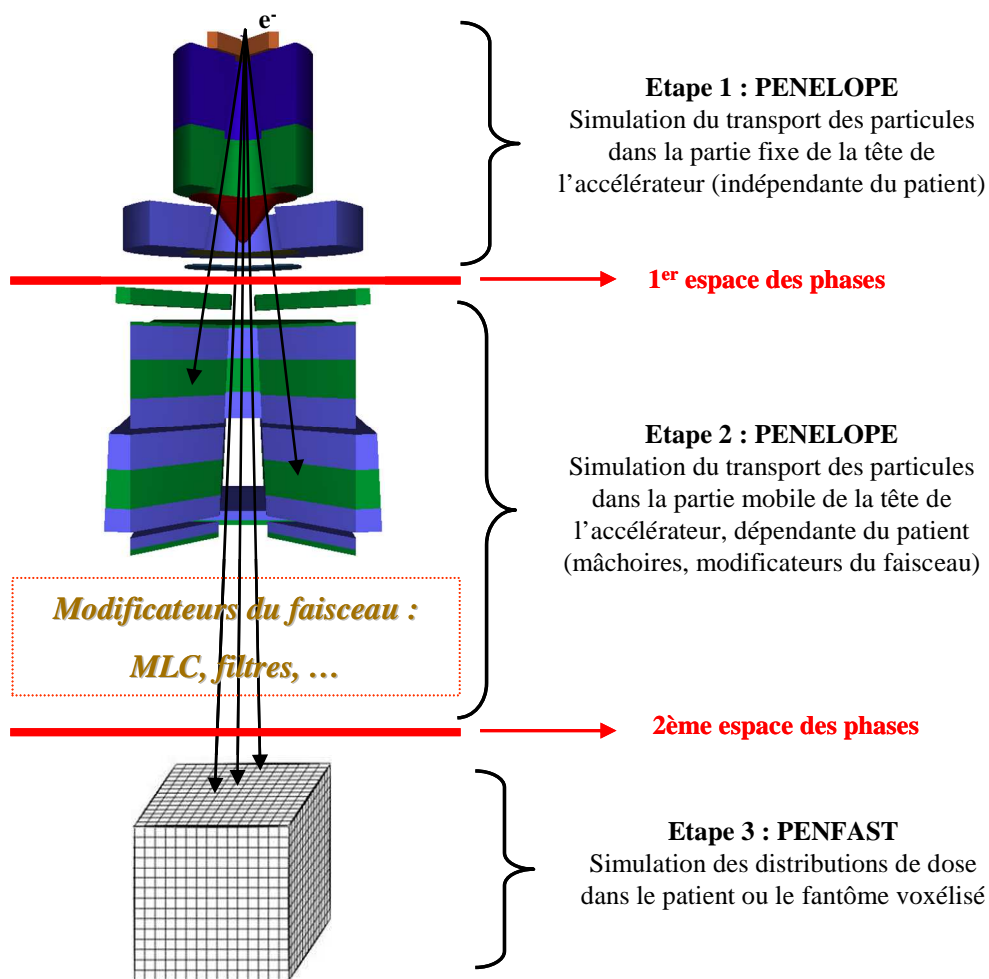


Figure 2 : Illustration des étapes d'un calcul de dose en radiothérapie externe à l'aide des deux codes MC PENELOPE et PENFAST.

La première étape est relative à la partie fixe de l'accélérateur (indépendante du patient), c'est-à-dire en amont de tous les accessoires qui peuvent être utilisés pour régler la taille ou la forme du champ. Dans cette étape de calcul, les particules sont suivies à travers les collimateurs primaires et secondaires, le cône égalisateur/paire de diffuseurs, et autres composants fixes. En mode électron, les paires de mâchoires X et Y qui définissent un champ carré ou rectangulaire pourront être incluses dans cette première étape car le nombre de positions possibles est limité. En mode photon, le nombre de positions de ces mâchoires n'étant pas limité, celles-ci ne feront sans doute pas partie de cette étape. La sortie de cette première phase de calcul est un PSF pour chaque configuration d'énergie et de taille de champ de l'accélérateur considéré. Les caractéristiques des particules (type de particule, énergie, position, direction, poids, etc.) sont enregistrées dans le PSF lorsqu'elles traversent le plan d'enregistrement positionné à la sortie de la partie fixe de la tête d'irradiation (Figure 2). Une bibliothèque de PSF pourra ainsi être constituée au préalable (en amont du calcul patient) et appelée lors de chaque calcul de dose dans un patient en évitant à chaque fois de recommencer la simulation.

Les étapes qui suivent sont relatives à tout ce qui est spécifique à chaque traitement. Elles incluent notamment, les accessoires positionnés pour la définition de la forme du champ. On distingue le cas des photons de celui des électrons. En mode photon, on peut faire apparaître, après la constitution des PSF fixes, une deuxième phase de simulation du transport des particules dans tous les accessoires mobiles permettant de régler finement le champ (paires de mâchoires X et Y variables, collimateur multilames, filtre en coin, caches, etc.). Cette simulation utilise en entrée un PSF de la bibliothèque, et donne en sortie un second PSF qui constituera l'entrée de la dernière phase de calcul (Figure 2). Cette phase de calcul intermédiaire n'est pas nécessaire en mode électron.

Le code MC généraliste PENELOPE est utilisé dans ces deux étapes du calcul pour une simulation fine du transport des particules (photon, électron et positon) dans la tête de l'accélérateur. Le calcul d'un PSF avec PENELOPE peut être très long (de l'ordre de plusieurs semaines). De ce fait, des algorithmes de réduction de variance peuvent s'appliquer dans la phase de simulation de la tête de l'accélérateur pour accélérer l'obtention des PSF avec PENELOPE.

La dernière étape consiste à calculer la distribution tridimensionnelle des doses dans la géométrie voxélisée du patient issue de son image TDM. Cette dernière phase de calcul est

réalisée avec le code MC accéléré PENFAST en utilisant en entrée le PSF calculé dans l'étape précédente (PSF de la bibliothèque pour le mode électron, PSF issu de la deuxième phase de calcul pour le mode photon). Etant donné que l'on élimine le temps de simulation des parties précédentes, on gagne du temps de calcul. En mode électron, il est possible d'effectuer ce calcul en incluant dans la géométrie, outre le patient, les inserts (qui définissent la forme et la taille du champ final du faisceau d'électrons) et la couche d'air présente entre l'insert et le patient. La sortie de ce calcul est une matrice de dose. Cette partie de la simulation est plus facile à réaliser en une durée réduite parce que la géométrie est plus simple et que le code PENFAST utilise une physique optimisée pour augmenter la vitesse du calcul.

5.2. Description générale des deux codes MC PENELOPE et PENFAST

5.2.1. PENELOPE

Le code MC PENELOPE (Baró *et al.* 1995 ; Sempau *et al.* 1997, Salvat *et al.* 1996, 2001, 2006), acronyme de PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons (les photons ayant été introduits plus tard), a été développé à l'Université des Sciences de Barcelone au début des années 90. PENELOPE permet une simulation fine du transport des photons, électrons et positons pour un large domaine d'énergie (allant de quelques centaines d'eV à 1 GeV), dans des matériaux de base dont le numéro atomique est compris entre 1 (hydrogène) et 99 (einsteinium), ainsi que pour des matériaux composés.

Le transport des photons est simulé par le biais de la simulation dite « détaillée ». Il s'agit de la méthode la plus exacte pour reproduire le transport des rayonnements, parce que les interactions physiques des particules ayant lieu sont prises en compte et simulées individuellement suivant une succession chronologique (Andreo 1991).

Les électrons et positons de haute énergie subissent un grand nombre d'interactions avant de disparaître ce qui rend quasiment impossible la simulation détaillée pour les énergies élevées. Les histoires des électrons et positons dans PENELOPE sont alors générées sur la base du schéma d'une simulation « mixte » (appelée aussi simulation de classe II dans la terminologie de Berger 1963), qui combine une simulation détaillée des événements à forte perte d'énergie et forte déviation angulaire (appelés événements « catastrophiques » ou « hard » en anglais) avec une simulation « condensée » des événements à faible perte d'énergie et faible déviation angulaire (appelés événements « mous » ou « soft » en anglais). L'effet global d'un nombre suffisant d'événements « mous », entre deux événements « catastrophiques », peut être ainsi

simulé avec précision en utilisant l'approche de la diffusion multiple. La gestion du transport des particules dans le milieu suivant le modèle de diffusion de PENELOPE est détaillée dans l'Annexe A.

Un programme de géométrie appelé PENGEO (Salvat *et al.* 2001, 2006) permet une modélisation détaillée de systèmes géométriques complexes de formes et compositions variées, en considérant des volumes homogènes limités par des surfaces quadratiques. L'Annexe A fournit une description détaillée de la structure complète du code PENELOPE composé d'un ensemble de programmes dédiés à la gestion de la partie physique et de trois fichiers d'entrée pour gérer les paramètres de simulation et la géométrie.

Le calcul de dose avec PENELOPE exige des temps de calculs très longs pour répondre aux contraintes de la routine clinique (comme avec tout autre code MC classique). Pour cela, un nouveau code MC rapide, nommé PENFAST, a été récemment développé par Salvat *et al.* (2008a, 2008b, en prep.) dans le cadre du projet européen MAESTRO. PENFAST est un code propriétaire implémenté comme une nouvelle fonctionnalité dans le TPS ISOgray™.

5.2.2. PENFAST

PENFAST permet une simulation rapide de la dose déposée par des photons, électrons et positons dans des géométries voxélisées (issues des images TDM) à partir des PSF pré-calculés avec PENELOPE. Ce code est fondé sur les mêmes modèles d'interactions physiques que ceux utilisés dans le code MC généraliste PENELOPE, mais il met en œuvre de nouveaux algorithmes de transport des électrons et positons afin de raccourcir le temps de la simulation.

Une des caractéristiques de PENFAST est l'utilisation de la simulation « condensée » (appelée aussi simulation de classe I dans la terminologie de Berger 1963) pour le transport des électrons et positons. Dans cette approche, l'effet collectif de toutes les interactions subies par un électron le long d'un pas de longueur donnée est simulé, d'une manière approximative, avec une seule étape de calcul. L'utilisation de la simulation classe I pour estimer la dose absorbée en radiothérapie est généralement moins précise que les algorithmes de classe II car dans la première, l'électron primaire n'est pas directement affecté par la création d'une particule secondaire. Les effets de la création d'électrons secondaires sont pris globalement en compte en échantillonnant une distribution de perte d'énergie de l'électron primaire (« straggling ») à chaque étape. Les théories de diffusion multiple de la simulation de classe I

sont alors incapables de prendre en compte précisément ces effets d'énergie « straggling ». PENFAST évite ce problème en utilisant des distributions de diffusion multiple (c'est-à-dire les distributions de perte d'énergie et les distributions angulaires) générées par le code PENELOPE. Cette procédure permet d'éviter la plupart des limitations des théories conventionnelles de diffusion multiple dans une simulation de classe I.

PENFAST utilise aussi un modèle simplifié de transport des photons adapté aux géométries voxélisées. Ce modèle a été conçu de manière à prendre pleinement avantage des particularités de la géométrie voxélisée issue d'une image TDM et de la variabilité limitée des numéros atomiques rencontrés en radiothérapie. En dehors de quelques petites simplifications, les modèles d'interactions physiques des photons adoptés dans PENFAST sont équivalents à ceux utilisés dans PENELOPE. Les aspects géométriques sont traités en utilisant la méthode dite « diffusion-delta » (Lux et Koblinger 1991, Kawrakow et Fippel 2000) qui ne nécessite pas de contrôle de la traversée d'interface et simplifie le suivi des photons à travers la géométrie voxélisée.

En pratique clinique, les images TDM, qui décrivent la morphologie du patient sont utilisées comme données d'entrée au calcul de dose avec le code PENFAST. L'information dans les images TDM est cependant exprimée en UH. L'utilisation de telles données implique donc la conversion des UH en matériau (composition atomique) et masse volumique requis par PENFAST pour chaque voxel de la géométrie. La conversion UH-matériau est effectuée en gammes d'UH. Tous les voxels ayant des UH situées dans une même plage sont affectés au même matériau. Ces matériaux sont définis dans un fichier lu par le code MC. Pour la conversion UH-masse volumique (en g.cm^{-3}), la courbe d'étalonnage du tomodensitomètre (masse volumique en fonction d'UH) est utilisée.

La version originale de PENFAST possède dans sa base de données les distributions de diffusion multiple de l'air, l'eau, l'os compact, le poumon, le titane et le plomb (les deux derniers matériaux sont utilisés pour des applications spécifiques: inserts pour les électrons et prothèses). En outre, le code donne la possibilité de générer de nouveaux matériaux en fonction des besoins pour une simulation MC dans le matériau approprié.

5.2.3. Conclusion

En conclusion, les différences entre PENELOPE et PENFAST sont essentiellement au nombre de deux :

- l’une concerne la physique des électrons et des photons, qui a été optimisée dans PENFAST pour l’application en radiothérapie.
- l’autre concerne la géométrie, PENELOPE pouvant prendre en compte des volumes et des compositions très complexes, tandis que PENFAST ne s’applique qu’à un volume composé de voxels parallélépipédiques avec un nombre de matériaux fixé à six dans la version originale du code.

De ce fait, PENFAST est beaucoup plus rapide grâce à son optimisation pour notre type d’application et grâce à l’utilisation des distributions de diffusion multiple générées au préalable avec des sous-routines du code PENELOPE. PENFAST est destiné au calcul de la distribution de la dose délivrée au patient en remplacement des modèles analytiques, moins précis, notamment en présence d’hétérogénéités et de petits faisceaux. Par contre, PENELOPE est utilisé en amont afin de simuler finement le transport des particules dans la tête de l’accélérateur et d’obtenir un PSF utilisé ensuite comme donnée d’entrée dans le calcul clinique.

5.3. Incertitudes associées aux calculs par Monte Carlo

Les résultats issus de calculs par MC sont généralement soumis à deux types d’incertitude A et B. L’incertitude globale s’exprime par :

$$\sigma = \sqrt{\sigma_A^2 + \sigma_B^2} \quad (\text{Eq. 1})$$

Les incertitudes non statistiques de type B sont difficiles à évaluer. Elles peuvent avoir pour origine le degré de précision des modèles physiques et des sections efficaces utilisés dans le code et les erreurs de programmation. Il est difficile d’avoir une idée exacte de l’impact de ces erreurs sur le résultat d’une simulation donnée, selon le domaine d’énergie, le type de particule et les matériaux étudiés. Salvat *et al.* (2006) donnent une idée des incertitudes systématiques liées à l’erreur sur les sections efficaces pour les modèles de diffusion de PENELOPE. Par ailleurs, différents tests d’évaluation du code (Mazurier *et al.* 1999, Das *et al.* 2002 ; Sempau *et al.* 2003 ; Carrasco *et al.* 2004, 2007 ; Blazy *et al.* 2006) ont montré un excellent accord entre les simulations PENELOPE et les données expérimentales et confirment ainsi la fiabilité des modèles de diffusion implémentés dans le code.

Les incertitudes statistiques de type A, inhérentes au calcul par MC, sont évaluées selon des méthodes classiques. Si Q est la quantité d'intérêt déterminée à partir d'une simulation MC avec N histoires, la valeur moyenne de Q est donnée par :

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad (\text{Eq. 2})$$

où q_i est la valeur calculée à la i -ème histoire.

L'incertitude statistique associée $\sigma_{\bar{Q}}$, correspondant à l'écart-type sur la moyenne, est déterminée à partir de la relation suivante :

$$\sigma_{\bar{Q}} = \sqrt{\frac{\text{var}(q)}{N}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - (\bar{Q})^2 \right)} \quad (\text{Eq. 3})$$

où $\text{var}(q)$ est la variance.

Pour un nombre d'histoires N suffisamment grand, l'intervalle $\bar{Q} \pm 3\sigma_{\bar{Q}}$ contient la valeur vraie de Q avec une probabilité de 99,7 % (hypothèse d'une loi normale).

Pour réduire l'incertitude statistique, il faut augmenter le nombre d'histoires simulées et donc augmenter le temps de simulation. Il est donc souvent nécessaire de trouver un compromis entre la précision et le nombre d'histoires simulées d'où l'intérêt des techniques de réduction de variance pour améliorer la précision des résultats sans pour autant augmenter le nombre d'histoires. Ces techniques seront décrites dans le prochain chapitre.

6. Comment valider le calcul de dose dans un TPS-MC ?

Les TPS-MC commerciaux sont fondés sur une nouvelle génération de codes MC incluant des simplifications afin de réduire les temps de calcul. Une validation de ces codes est donc indispensable, avant toute utilisation clinique du TPS-MC, pour évaluer la précision sur la dose calculée.

6.1. Procédure de validation du calcul de dose par MC

Il existe deux manières pour valider un outil de calcul de dose par MC :

- En comparant les distributions de dose calculées avec les mesures expérimentales correspondantes.
- En comparant les résultats entre codes de MC dont l'un a été préalablement validé par les mesures (comme par exemple PENELOPE). Il est, en effet, admis qu'un système de

calcul de dose par MC, soigneusement validé par des mesures, offre un outil d'évaluation supplémentaire pour la planification du traitement, dans des situations où les mesures sont difficiles, voire impossibles (Mohan 1997, Chetty *et al.* 2007, Reynaert *et al.* 2007).

La procédure de vérification d'un TPS-MC est, en grande partie, semblable à celle des TPS conventionnels. Des guides pratiques sur la procédure de validation d'un TPS ont été établis par divers groupes de travail (AAPM 1995 et 1998, ESTRO 2004, IAEA 2004, NCS 2006). Cependant, les méthodes MC possèdent quelques aspects spécifiques qu'il faudra vérifier. Ces aspects sont décrits dans les paragraphes suivants.

6.1.1. Validation de la simulation du faisceau

Les TPS-MC utilisent, pour le calcul de dose, des données qui définissent la source de rayonnements. Il existe, généralement, deux types de sources représentant la tête de l'accélérateur linéaire (Reynaert *et al.* 2007) : (1) un fichier d'espace des phases (en anglais phase space file ou PSF) fondé sur une simulation complète de la tête de l'accélérateur. (2) un modèle de sources virtuelles qui reproduit le rayonnement de la tête de l'accélérateur. La simulation des deux types de sources est généralement vérifiée par comparaison des rendements en profondeur et des profils de dose simulés avec ceux de référence (mesures ou résultats de MC valides) dans un fantôme d'eau homogène (l'eau est le matériau de référence en radiothérapie) pour plusieurs tailles de champs (Libby *et al.* 1999, Ma et Jiang 1999, Lin *et al.* 2001, Verhaegen et Seuntjens 2003, Pena *et al.* 2004).

6.1.2. Validation des techniques de réduction de variance

Les TPS-MC utilisent parfois des techniques de réduction de variance pour accélérer le calcul de dose par MC. Cependant, ces techniques, mal utilisées, peuvent influencer les distributions de dose calculées. Une validation est alors nécessaire en comparant les calculs de dose avec et sans utilisation d'une technique particulière de réduction de variance (Kawrakow et Fippel 2000, Salvat *et al.* 2006, Reynaert *et al.* 2007).

6.1.3. Validation des données matériaux

Contrairement aux TPS conventionnels, les TPS-MC ont besoin de la composition atomique et de la masse volumique de chaque voxel de la géométrie. Par conséquent, la conversion de l'information dans l'image TDM (UH) en données de simulation est nécessaire dans les TPS-

MC. En utilisant un fantôme hétérogène (par exemple un fantôme utilisé pour le contrôle qualité des TDM) dont on connaît les caractéristiques (dimension, composition et densité), le processus de conversion UH-matériau et UH-densité peut être vérifié. Il suffit en effet de comparer les distributions de dose calculées d'une part en utilisant l'image TDM du fantôme et d'autre part en utilisant la géométrie voxélisée générée numériquement avec les caractéristiques physiques et géométriques réelles (Verhaegen et Devic 2005, Reynaert *et al.* 2007).

6.1.4. Validation dosimétrique des modèles physiques

Pour la vérification des performances dosimétriques, en plus des tests traditionnels (tels que l'influence de la distance à la source, de l'asymétrie, de la forme du champ complexe, des modificateurs de faisceaux, de l'obliquité de surface, etc.), des tests spécifiques en configurations complexes (manque d'équilibre électronique, manque de volume diffusant, etc.) sont nécessaires pour exploiter les avantages des méthodes MC considérées plus précises que les méthodes conventionnelles correspondantes.

Par exemple, la vérification des distributions de dose, dans un fantôme présentant des hétérogénéités de faible et/ou de forte densité, pour différentes tailles de champ et qualités de faisceau, est nécessaire pour l'évaluation de la précision du transport des particules dans des conditions de déséquilibre électronique (perturbation de la fluence des photons et d'électrons due à la présence de l'hétérogénéité) (Wang *et al.* 1999, Carrasco *et al.* 2004, Chetty *et al.* 2007).

Des vérifications de la dose devraient également être effectuées dans des situations plus cliniques comme par exemple dans des fantômes anthropomorphiques. Tous ces tests peuvent être effectués par comparaison des distributions de dose à évaluer avec celles de référence en une, deux et/ou trois dimensions dans le fantôme (AAPM 1995 et 1998, ESTRO 2004, IAEA 2004).

6.2. Index gamma

Aujourd'hui, l'outil couramment utilisé en routine clinique pour évaluer les distributions de dose calculées dans les TPS en radiothérapie est l'index gamma γ (Low *et al.* 1998, Van Esch *et al.* 2002, Stock *et al.* 2005, Childress *et al.* 2005, Nelms et Simon 2007). Il s'agit d'un outil introduit pour la comparaison quantitative de deux distributions de dose, l'une étant considérée comme la distribution de référence $D_r(x)$ et l'autre comme celle à évaluer $D_e(x)$.

L'index gamma combine simultanément un test d'écart de distance et un test de différence de dose (Low *et al.* 1998, Low et Dempsey 2003). Les critères d'acceptabilité sont définis par ΔD_{\max} (%) pour la différence de dose maximale acceptable, et par DTA (acronyme anglais de Distance To Agreement, exprimé en mm) pour l'écart de distance maximal acceptable. Une ellipse d'acceptabilité, de demi-axes correspondant aux deux critères d'acceptabilité de l'index gamma, est définie autour de chaque point de la distribution de référence (Figure 3).

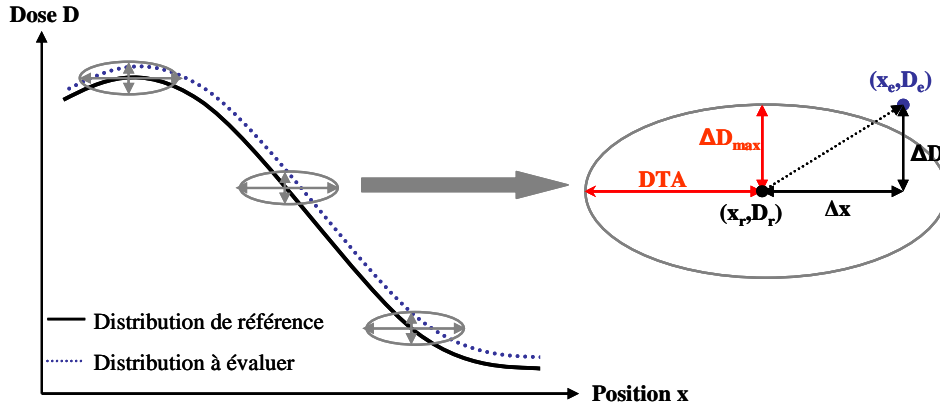


Figure 3 : Principe de l'index gamma (Low *et al.* 1998).

L'index gamma, correspondant à un point donné (x_r, D_r) de la distribution de référence, est déterminé par le point de la distribution à évaluer (x_e, D_e) qui a la plus petite déviation par rapport au point de référence. Cette valeur minimale est considérée comme l'indice de qualité γ . Si $\gamma < 1$, la correspondance entre le point de référence et celui à évaluer répond aux critères de tolérance. Si $\gamma > 1$, la correspondance entre le point de référence et le point à évaluer est en dehors des critères de tolérance. L'index gamma au point (x_r, D_r) est calculé suivant l'expression suivante :

$$\gamma(x_r, D_r) = \min \left[\sqrt{\frac{\Delta D^2}{\Delta D_{\max}^2} + \frac{\Delta x^2}{DTA^2}} \right] \quad \forall (x_e, D_e) \quad (\text{Eq. 4})$$

où, $\Delta D = |D_e(x_e) - D_r(x_r)|$ est la différence de dose entre le point de référence et celui à évaluer. Et $\Delta x = |x_e - x_r|$ est la différence de position entre le point de référence et celui à évaluer.

Certains auteurs ont toutefois mis en évidence des limitations de l'index gamma. Par exemple, Depuydt *et al.* (2002), Bakai *et al.* (2003), Ju *et al.* (2008), Blanpain et Mercier (2009) ont démontré que l'index gamma risque d'être surestimé dans les régions à fort gradient de dose et ainsi avoir de faux positifs. Ces auteurs proposent de nouvelles approches pour éviter ce

problème, par exemple échantillonner les distributions de dose à évaluer avant le calcul de l'index gamma ou encore utiliser la méthode de l'index χ qui considère un tube continu d'acceptabilité enveloppant la distribution de référence (au lieu d'ellipses avec l'index γ). Des études récentes (Ju *et al.* 2008, Blanpain et Mercier 2009) proposent de nouveaux outils appropriés permettant de comparer deux distributions de dose sans avoir de faux positifs.

Il est évident que toutes ces approches apportent des solutions fiables aux limitations de l'index gamma. Cependant, ces outils ne sont pas encore utilisés en routine clinique et à ce jour, seul l'index gamma est reconnu et utilisé en radiothérapie. Par conséquent, pour être en adéquation avec les outils utilisés en routine clinique, seul l'index gamma a été utilisé au cours de cette étude pour évaluer la concordance entre les distributions de dose (rendements en profondeur et profils de dose) mesurées et calculées.

6.3. Critères d'acceptabilité pour la validation du calcul de dose

Les critères d'acceptabilité requis pour vérifier l'exactitude du calcul de la dose dans un TPS dépendent à la fois du type d'algorithme de calcul (analytique ou MC), des zones géométriques du faisceau (pénombre, « build-up », axe du faisceau, intérieur ou extérieur du faisceau) et de la complexité de la géométrie du milieu (région homogène ou hétérogène, champ symétrique ou asymétrique, obliquité, etc.). De nombreuses études antérieures ont défini des critères d'acceptabilité adaptés à la complexité des applications cliniques pour valider le calcul des distributions de dose dans les TPS par rapport aux mesures expérimentales (ICRU 1987, Brahme *et al.* 1988, Van Dyk *et al.* 1993, AAPM 1998, Venselaar *et al.* 2001). Deux exemples définissant ces critères d'acceptabilité sont illustrés dans les Tableaux 2 (AAPM 1998) et 3 (Venselaar *et al.* 2001).

La Figure 4 permet d'illustrer les régions du rendement en profondeur et du profil de dose identifiées dans les Tableaux 2 et 3 et pour lesquelles les critères d'acceptabilité sont appliqués.

Les écarts de dose sont exprimés en pourcentage de la dose mesurée localement (Venselaar *et al.* 2001) ou en pourcentage de la dose maximale mesurée sur l'axe (AAPM 1998) :

$$Ecart(\%) = 100 \times \frac{(D_{calc} - D_{mes})}{D_m} \quad (\text{Eq. 5})$$

où, D_{calc} est la dose calculée au point d'intérêt, D_{mes} est la dose mesurée au point d'intérêt et

D_m est la dose maximale mesurée sur l'axe (AAPM 1998) ou la dose mesurée au point d'intérêt (Venselaar et al. 2001).

Tableau 2 : Critères d'acceptabilité suggérés par l'AAPM (1998) pour le calcul de dose en radiothérapie externe.

Configurations	Axe du faisceau (%)	Intérieur du faisceau (%)	Pénombre (mm)	Extérieur du faisceau (%)	« Build-up » (%)
Fantômes homogènes					
Champs carrés	1	1,5	2	2	20
Champs rectangulaires	1,5	2	2	2	20
Champs asymétriques	2	3	2	3	20
Champs complexes définis par collimateur multilames	2	3	3	5	20
Filtre en coin	2	5	3	5	50
Obliquité du faisceau	1	3	2	5	20
Variations de Distance Source - Surface	1	1,5	2	2	40
Fantômes hétérogènes*					
Hétérogénéités en plaque	3	5	5	5	-
Hétérogénéités en 3D (type anthropomorphe)	5	7	7	7	-

*A l'exception des régions de déséquilibre électronique.

Tableau 3 : Critères d'acceptabilité suggérés par Venselaar et al. (2001) pour le calcul de dose en radiothérapie externe.

Région	1. Géométrie simple (homogène)	2. Géométrie complexe (filtre en coin, hétérogénéité, asymétrie)	Géométrie plus complexe (combinaisons de 1 et 2)
Axe du faisceau (dose élevée, faible gradient)	2 %	3 %	4 %
« Build-up » et pénombre (dose élevée, fort gradient)*	2 mm ou 10 %	3 mm ou 15 %	3 mm ou 15 %
Hors axe du faisceau (dose élevée, faible gradient)	3 %	3 %	4 %
Hors champ (faible dose, faible gradient)	30 %	40%	50 %

* Ces valeurs sont, de préférence, exprimées en mm. Un décalage de 1 mm correspondant à une variation de la dose de 5 % est supposé être une valeur réaliste dans les régions de dose élevée et à fort gradient de dose.

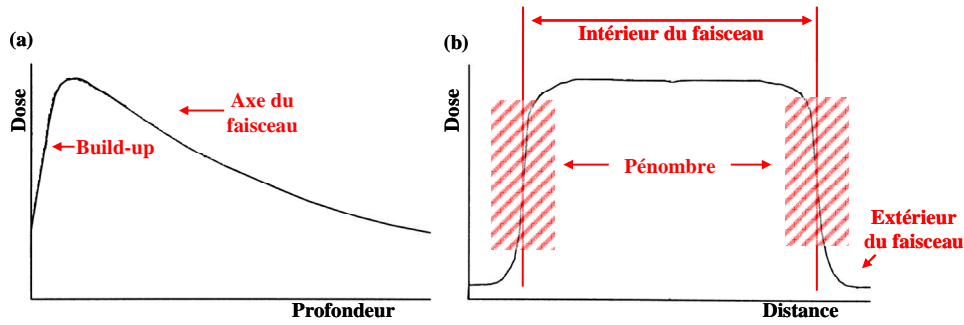


Figure 4 : Illustration des régions pour lesquelles les algorithmes de calcul de dose présentent des performances variables : (a) rendement en profondeur ; (b) profil de dose (AAPM 1998, Venselaar *et al.* 2001).

Les valeurs présentées dans les Tableaux 2 et 3 sont valables pour des algorithmes conventionnels de calcul de dose (hors MC). Les performances d'un TPS-MC devront donc au moins répondre à ces exigences. Par conséquent, dans le cadre de cette étude, les valeurs des critères d'acceptabilité affectées aux paramètres ΔD_{\max} (écart de dose) et DTA (écart de distance) de l'index gamma ont été respectivement choisies égales à 1 % et 1 mm, pour évaluer les rendements en profondeur et les profils de dose dans le fantôme homogène. La région du « build-up » des rendements en profondeur et la pénombre des profils de dose ont également été évaluées avec ces mêmes critères puisque la simulation MC du « build-up » est directement affectée par la contamination électronique liée à la composition et à la géométrie des éléments de la tête d'irradiation, et la pénombre dépend de la taille du champ. Dans les fantômes hétérogènes, les valeurs de 2 % et 2 mm ont été retenues.

7. Conclusions

Nous avons rappelé dans ce chapitre l'évolution des méthodes de calcul de dose en radiothérapie externe menant vers une utilisation indispensable des méthodes MC au sein des outils de planification des traitements. Les avantages des méthodes MC de calcul de dose par rapport aux méthodes conventionnelles actuellement utilisées dans les TPS ont été ainsi décrits. A ce titre, les deux codes MC PENELOPE et PENFAST, qui seront utilisés dans notre étude, ont été présentés.

Cependant, la dose calculée par MC est donnée avec une marge d'erreur résultante des sections efficaces implémentées dans le code, des données d'entrée (PSF, géométrie, matériaux) et des incertitudes statistiques. Il est donc indispensable de mener une validation du code TPS-MC avant son utilisation clinique. La procédure de validation d'un outil de

calcul de dose par MC, l'index gamma ainsi que les critères d'acceptabilité ont été ainsi décrits dans ce chapitre. Une validation des méthodes de réduction du temps calcul introduites dans les deux codes PENELOPE et PENFAST sera menée dans le Chapitre II. La validation expérimentale des modèles physiques utilisés dans le TPS-MC sera présentée dans les Chapitre IV et V.

Chapitre II

ACCELERATION DES CODES MONTE CARLO

PENELOPE ET PENFAST

1. Introduction

Les TPS en radiothérapie devraient fournir une précision de 3 % sur le calcul de dose (Ahnesjö et Aspradakis 1999, Fraas *et al.* 2003, IAEA 2004), avec une durée acceptable (moins de 10 minutes). Avec les moyens de calcul habituels, la plupart des méthodes MC sont suffisamment rapides pour simuler le dépôt de dose dans des milieux homogènes et des géométries simples, mais les applications en radiothérapie comportent des configurations plus complexes. La géométrie de la tête d'irradiation est très complexe et comporte de nombreux éléments de différentes compositions. En outre, la géométrie du patient est généralement simulée par une matrice formée d'un grand nombre de voxels parallélépipédiques. La simulation MC de grande précision du transport des particules dans la tête d'un accélérateur linéaire d'électrons peut prendre plusieurs semaines sur un ordinateur monoprocesseur. Actuellement, la simulation MC de la dose absorbée pour de tels problèmes à grande échelle exige d'importantes ressources informatiques, y compris la programmation parallèle. L'efficacité de la simulation peut être aussi sensiblement améliorée en profitant des techniques courantes de réduction de variance (Rogers *et al.* 1995, Kawrakow et Fippel 2000, Salvat *et al.* 2006).

Le code MC PENELOPE (Baró *et al.* 1995, Salvat *et al.* 2001, Salvat *et al.* 2006), ainsi que sa version accélérée PENFAST (Salvat *et al.* 2008a et 2008b, Salvat *et al.* en prep.) ont été choisis dans le cadre du projet TELEDOS, pour le calcul de dose par MC dans le TPS ISOgray™. L'intérêt de ces deux codes, est de recourir aux méthodes statistiques de MC, aptes à donner des calculs du dépôt de dose très proches de la réalité en répondant au critère de précision exigé. En contrepartie, les temps de calcul sont beaucoup plus longs pour être utilisés en clinique. Dans le cadre de ce projet, un objectif principal a été de réduire les temps de calculs MC PENELOPE et PENFAST en vue de leur utilisation clinique en radiothérapie.

Pour l'atteindre, plusieurs algorithmes de réduction de variance ont été implémentés dans le code PENELOPE, version 2006 (Salvat *et al.* 2006) : le « splitting » du rayonnement de freinage, la roulette russe et le « splitting » angulaires ainsi que le « splitting » circulaire (Poumarède *et al.* 2008). En outre, les deux codes MC PENELOPE et PENFAST ont été parallélisés en utilisant l'interface MPI (acronyme de Message Passing Interface, MPI 1997, Tola *et al.* 2006).

L'objectif de l'étude décrite dans ce chapitre est d'optimiser et de valider les différentes améliorations apportées aux deux codes MC PENELOPE et PENFAST et de mesurer leur performance en terme de gain en temps de calcul avant leur utilisation pour le calcul prévisionnel de la dose en radiothérapie.

La première partie de ce chapitre aborde la parallélisation des deux codes afin d'effectuer le calcul simultanément sur plusieurs processeurs. La seconde partie est consacrée aux techniques de réduction de variance introduites dans le code PENELOPE. L'optimisation de ces méthodes afin d'obtenir le gain en performance voulu ainsi que leur validation sont également présentées.

2. Parallélisation des deux codes MC PENELOPE et PENFAST

2.1. Principe de la parallélisation

De nos jours, les ordinateurs, constitués de plusieurs processeurs autonomes reliés ensemble, deviennent largement disponibles aux communautés médicales et universitaires. L'idée fondamentale de la parallélisation est de partager un long calcul en plusieurs calculs qui sont alors lancés simultanément sur différents processeurs. De ce fait, on augmente efficacement la vitesse par un facteur qui est égal au nombre de processeurs impliqués.

Selon le principe de la méthode MC décrite précédemment (cf. Chapitre I), la parallélisation du calcul en répartissant le nombre d'histoires simulées entre plusieurs processeurs permet de réduire le temps d'un facteur proportionnel au nombre de processeurs utilisés. En effet, le calcul par MC, du fait du cumul statistique des résultats, est facilement parallélisable. Récemment, dans le cadre du projet TELEDOS, les deux codes PENELOPE (version 2006) et PENFAST ont été parallélisés de la même manière en utilisant l'interface MPI (MPI 1997) et un générateur parallèle de nombres pseudo-aléatoires (Brent 2006, Tola *et al.* 2006). Les codes parallélisés, fonctionnent pour un nombre N_p quelconque de processeurs avec, pour

$N_p > 1$, un processeur « maître » chargé de la gestion des fichiers, et N_p-1 processeurs « esclaves » dédiés au calcul par MC. Toutes les fonctionnalités des codes standards PENELOPE (version 2006) et PENFAST non parallélisés ont été maintenues dans leur version parallélisée. L'Annexe B présente un aperçu des caractéristiques de la parallélisation des deux codes dans les différentes étapes du calcul.

Il est important de noter que la distribution du calcul par MC sur plusieurs processeurs n'a de sens que si les contributions à la quantité d'intérêt des particules simulées par les différents processeurs ne sont pas corrélées. Dans le cas contraire, on répétera inutilement les calculs sur les différents processeurs et du point de vue statistique, la variance des grandeurs simulées ne sera pas réduite. Le générateur de nombres pseudo-aléatoires doit alors remplir une condition importante, c'est-à-dire que les séquences de nombres pseudo-aléatoires générés devront être indépendantes sur les machines parallèles avec une période suffisamment grande (Mascagni 1999).

2.2. Validation de la parallélisation des deux codes MC PENELOPE et PENFAST

La validation des deux codes parallélisés à l'aide de l'interface MPI et d'un générateur parallèle de nombres pseudo-aléatoires a été réalisée dans le cas de notre application de calcul de dose en radiothérapie. Des comparaisons entre les résultats des codes parallélisés et ceux des codes standards (non parallélisés) ont été effectuées dans le cas de l'accélérateur linéaire Saturne 43 installé au LNHB. En outre, des tests de scalabilité¹ ont été effectués pour montrer les performances en terme de gain en temps de calcul.

Dans les comparaisons qui suivent, le code PENELOPE standard (version 2006 non parallélisée) et sa version parallélisée sont appelés PENELOPE et PENELOPE-MPI respectivement. Par analogie, les deux codes PENFAST et PENFAST-MPI sont comparés dans le but de valider ce dernier. Pour toutes les figures, la différence relative des grandeurs A (relative au code parallèle) et B (relative au code standard) est définie par :

$$\text{différence relative} = 100 \times \frac{A - B}{\text{moyenne}(A, B)} \quad (\text{Eq. 1})$$

Et $\pm 3\sigma$ représente ± 3 écarts-types de la grandeur moyenne de A et B :

¹ Mot informatique signifiant une extensibilité. Dans notre cas, il s'agit de la capacité du système à évoluer en fonction du nombre de processeurs.

$$\sigma = \frac{\sqrt{\sigma_A^2 + \sigma_B^2}}{2} \quad (\text{Eq. 2})$$

où σ_A et σ_B sont respectivement les écarts-types des grandeurs A et B .

2.2.1. PENELOPE

L'objectif de cette étude est de vérifier que les résultats obtenus en mode parallélisé sont identiques à ceux obtenus avec le code PENELOPE non parallélisé. Cette vérification est réalisée en effectuant les tests suivants :

- Comparaison des spectres en énergie à la sortie de la tête de l'accélérateur entre PENELOPE et PENELOPE-MPI.
- Comparaison des distributions de dose dans l'eau entre PENELOPE et PENELOPE-MPI.

Dans toutes les comparaisons, les mêmes données d'entrée (géométrie, matériaux, paramètres de simulation : énergies de coupure, taille de voxels, etc.) ont été utilisées dans les deux calculs parallèle et non parallèle.

Les calculs parallèles ont été effectués sur 4 processeurs 64 bits AMD Opteron, $4 \times 2,4$ GHz, avec 12 Go de mémoire RAM.

2.2.1.1. Spectres en énergie à la sortie de la tête de l'accélérateur

La simulation du transport des particules dans la tête de l'accélérateur Saturne 43, pour un faisceau de photons de 12 MV, de champ 10×10 cm², a été effectuée d'une part avec le code PENELOPE non parallélisé, et d'autre part avec le code PENELOPE-MPI sur 4 processeurs. A la fin de chacune des deux simulations, un PSF a été obtenu à 90 cm de la cible. La Figure 1 présente une visualisation en deux dimensions de la géométrie modélisée.

La comparaison des spectres en énergie des particules présentes dans les deux PSF calculés est illustrée sur la Figure 2. Les résultats montrent que les différences relatives entre les deux spectres sont inférieures aux incertitudes statistiques associées aux calculs.

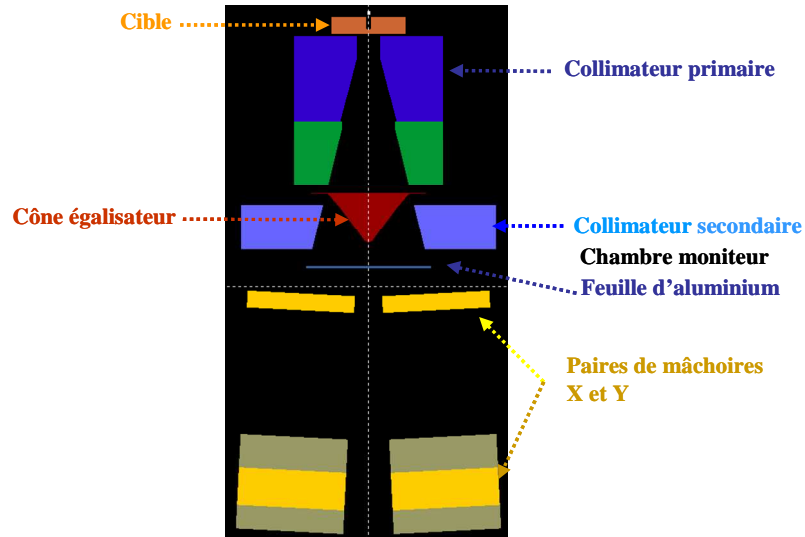


Figure 1 : Visualisation avec le logiciel GVIEW2D de la tête de l'accélérateur Saturne 43 pour le faisceau de photons de 12 MV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

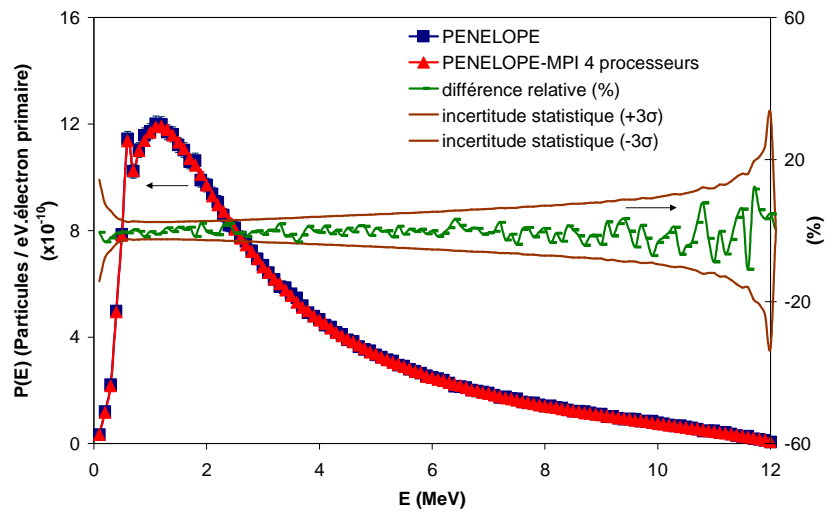


Figure 2 : Comparaison des spectres en énergie à 90 cm de la cible calculés avec PENELOPE et PENELOPE-MPI sur 4 processeurs. La différence relative entre les deux spectres ainsi que les incertitudes statistiques associées aux calculs sont représentées sur l'axe des ordonnées de droite.

2.2.1.2. Distributions de dose

Le calcul des distributions de dose à partir d'un PSF avec le code PENELOPE-MPI a été aussi vérifié. Ce code servira par la suite à calculer les distributions de dose dans l'eau pour l'ajustement des paramètres du faisceau d'électrons primaires et à valider les distributions de dose calculées par le code PENFAST parallélisé en milieu hétérogène.

Les profils de dose en profondeur et en latéral (à 10 cm de profondeur dans l'eau) calculés avec PENELOPE-MPI sur 4 processeurs ont été comparés à ceux calculés avec le code PENELOPE. Le même PSF du faisceau de photons de 12 MV calculé précédemment avec PENELOPE a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec PENELOPE et PENELOPE-MPI dans une cuve à eau de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ placée à 90 cm de la cible.

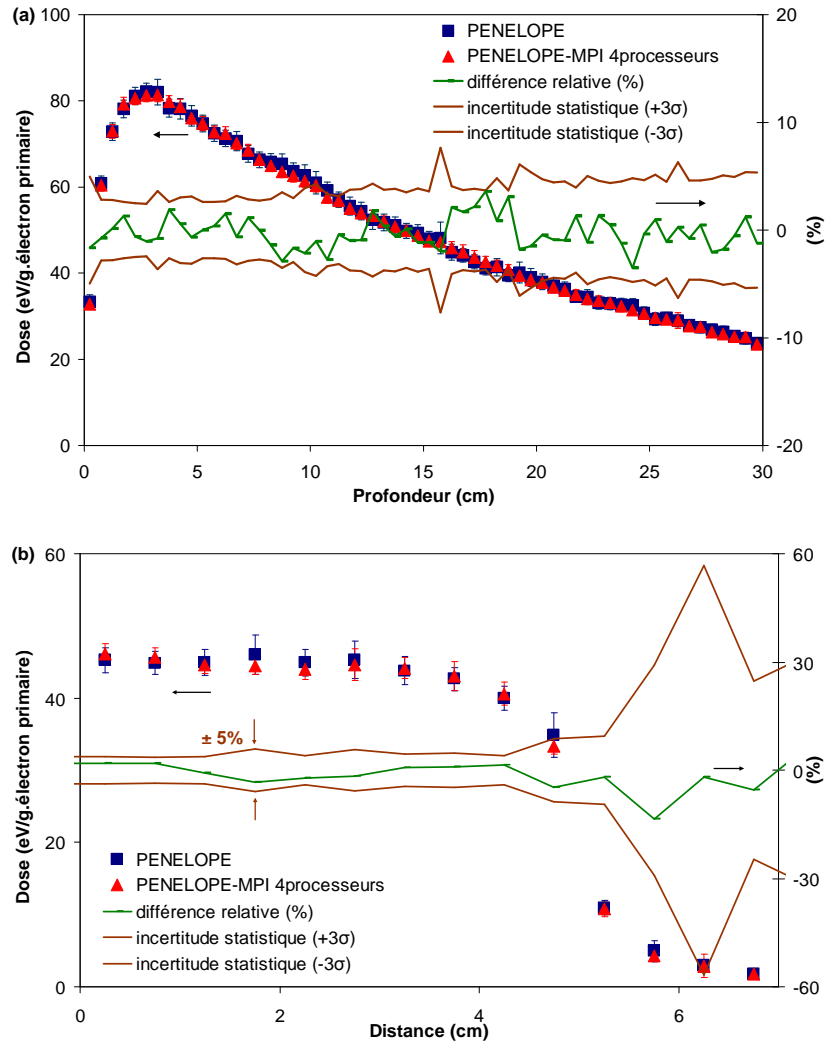


Figure 3 : Comparaison des courbes de dose en profondeur (a) et profils de dose (b) entre PENELOPE et PENELOPE-MPI sur 4 processeurs. La différence relative entre les deux distributions ainsi que les incertitudes statistiques associées aux calculs sont représentées sur l'axe des ordonnées de droite.

Les résultats sont présentés sur la Figure 3. Ils montrent que les distributions de dose obtenues avec le code parallélisé sont identiques à celles obtenues sans parallélisation aux incertitudes statistiques près. Il est important de préciser que l'incertitude statistique associée à la dose calculée en dehors du champ (distances latérales supérieures à 5 cm) est élevée (jusqu'à 60 %)

(Figure 3b). Ceci est dû au nombre limité de particules arrivant à déposer leur énergie à ces distances.

On considère que l'ensemble des résultats présentés dans les Figures 2 et 3 valide le code PENELOPE-MPI dans les deux phases du calcul concernant la simulation du transport des particules dans la tête d'irradiation pour l'obtention d'un PSF et la simulation de la distribution de dose dans un fantôme.

2.2.1.3. Tests de scalabilité

Afin de montrer les performances du code PENELOPE-MPI en terme de gain en temps de calcul, des tests de scalabilité ont été réalisés sur le « cluster » du CEA de 20 processeurs correspondant à 5 machines différentes. Cette étude a été effectuée dans le cas de la simulation du faisceau de photons de 12 MV du Saturne 43 pour l'obtention d'un PSF à la sortie de la tête de l'accélérateur. Les mêmes données d'entrée et le même nombre d'histoires simulées ont été utilisés pour les calculs sur un nombre croissant de processeurs.

La Figure 4 montre la variation du facteur de gain en temps de calcul, par rapport au calcul sur un seul processeur, en fonction du nombre de processeurs utilisés.

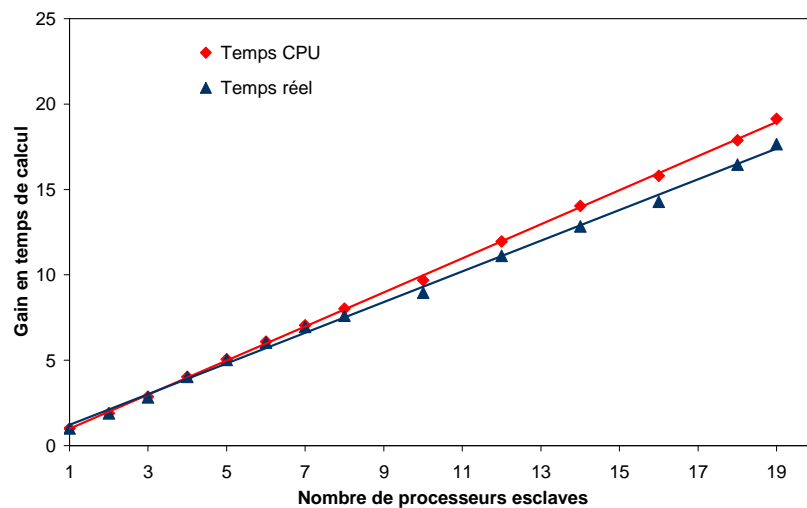


Figure 4 : Evolution du gain en temps de calcul (temps CPU et temps réel) en fonction du nombre de processeurs utilisés.

Cette figure montre un gain en temps CPU quasi-linéaire en fonction du nombre de processeurs utilisés jusqu'à au moins 20 processeurs (dont un processeur « maître »), en obtenant dans ce cas un gain d'un facteur 19 en efficacité de calcul. Des tests réalisés dans le

cadre du projet TELEDOS (Vassard 2007) ont montré que la performance du code parallèle est proportionnelle au nombre de processeurs de calcul mis à disposition jusqu'à 80 processeurs. En effet, le calcul par MC, du fait du cumul statistique des résultats, est complètement parallélisable. Par contre, la Figure 4 montre que le gain en temps réel est plus faible. En effet, pour un grand nombre de processeurs en parallèle, une perte de temps est introduite par le transfert des données à travers le réseau.

2.2.2. PENFAST

2.2.2.1. Distributions de dose

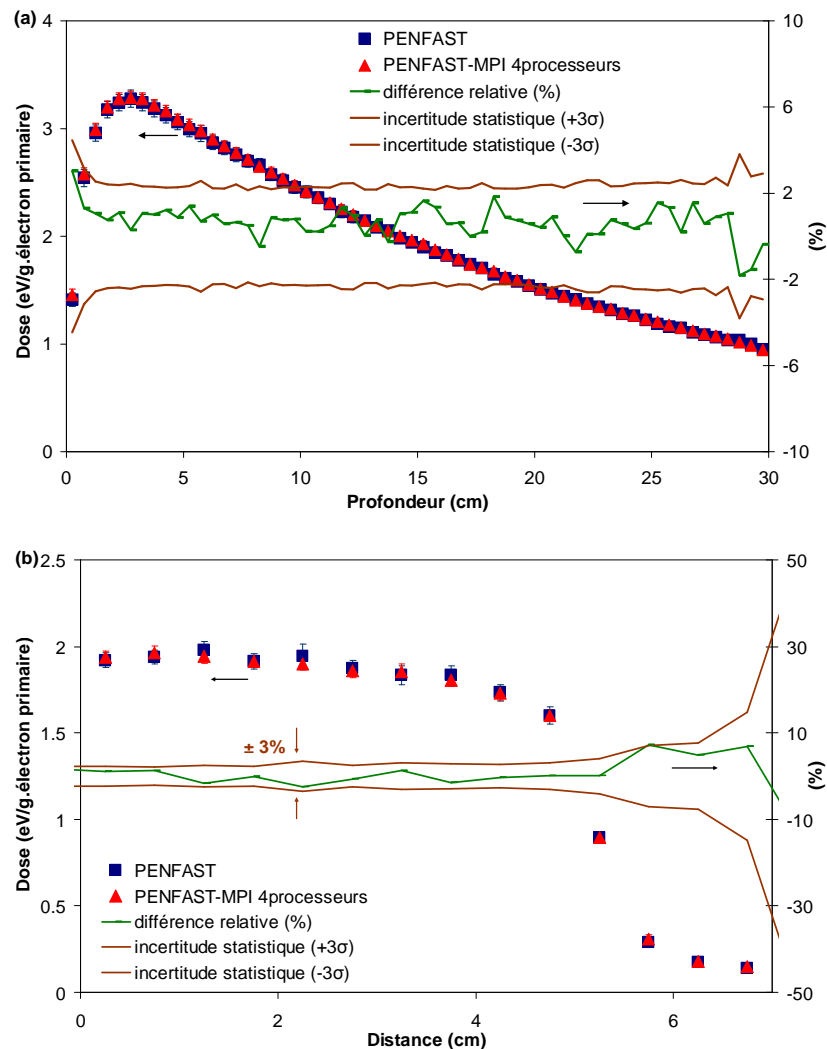


Figure 5 : Comparaison des courbes de dose en profondeur (a) et profils de dose (b) entre PENFAST et PENFAST-MPI sur 4 processeurs. La différence relative entre les deux distributions ainsi que les incertitudes statistiques associées aux calculs sont représentées sur l'axe des ordonnées de droite.

La parallélisation du code PENFAST a été testée en comparant les distributions de dose dans l'eau obtenues avec PENFAST-MPI à celles calculées avec le code PENFAST standard non parallélisé. Le même PSF du faisceau de photons de 12 MV calculé précédemment avec PENELOPE a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec PENFAST et PENFAST-MPI dans une cuve à eau de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ placée à 90 cm de la cible.

La Figure 5 montre les profils de dose en profondeur et en latéral (à 10 cm de profondeur dans l'eau) calculés avec le code PENFAST-MPI sur 4 processeurs et le code PENFAST sur un simple processeur. Les distributions de dose obtenues avec et sans parallélisation sont comparables. Les différences relatives sont inférieures aux incertitudes statistiques associées aux calculs. Ces résultats valident ainsi le code PENFAST-MPI. La physique de ce dernier fera l'objet d'une évaluation dans les chapitres suivants avant toute utilisation clinique effective.

2.2.2.2. Tests de scalabilité

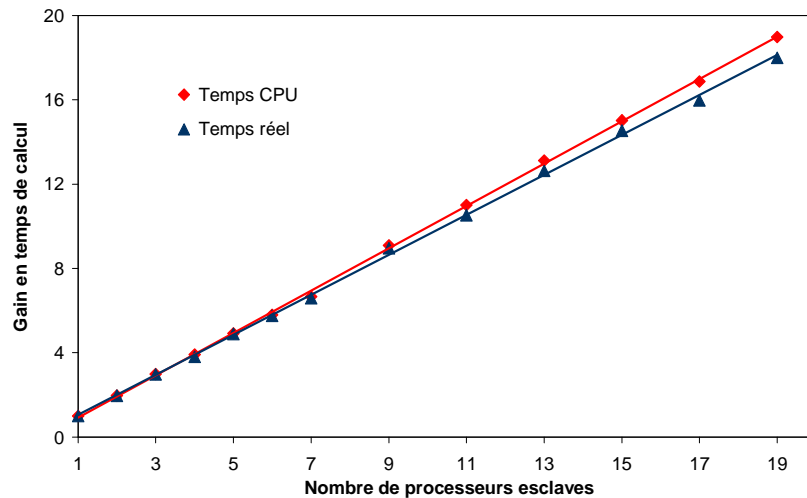


Figure 6 : Evolution du gain en temps de calcul (temps CPU et temps réel) en fonction du nombre de processeurs utilisés.

La scalabilité du code PENFAST-MPI a été vérifiée sur le « cluster » du CEA de 20 processeurs, dans le cas du calcul de dose effectué à partir du PSF du faisceau de photons de 12 MV. Les mêmes données d'entrée et le même nombre d'histoires simulées ont été ainsi utilisés pour les calculs sur un nombre croissant de processeurs. La variation du facteur de

gain en temps de calcul, par rapport au calcul sur un seul processeur, en fonction du nombre de processeurs utilisés est représentée sur la Figure 6.

Cette figure montre que le gain en temps de calcul augmente quasi-linéairement avec le nombre de processeurs utilisés en parallèle, et ceci jusqu'à 20 processeurs (dont un processeur « maître »), en obtenant dans ce cas un gain d'un facteur 19 en efficacité de calcul. Des tests plus complets réalisés dans le cadre du projet TELEDOS sur une architecture dédiée ont montré que la performance est proportionnelle au nombre de processeurs de calcul jusqu'à 80 processeurs.

3. Techniques de réduction de variance dans PENELOPE

Les simulations MC, utilisant les fonctions de densité de probabilité réelles, demandent un temps de calcul relativement long pour fournir des résultats statistiquement satisfaisants. En radiothérapie, une majeure partie des photons générés dans la tête de l'accélérateur doit être rejetée car ils ne contribuent pas à la grandeur calculée. Des techniques de réduction de variance adaptées au problème traité, permettent de réduire significativement le temps de calcul de la grandeur d'intérêt pour une incertitude donnée et d'améliorer ainsi l'efficacité de la simulation. Ces techniques sont fondées sur la modification des fonctions de densité de probabilité, afin de privilégier l'occurrence des événements utiles. Pour tenir compte des modifications apportées aux processus physiques simulés, on associe à chaque particule un poids qui représente la probabilité de réalisation de l'histoire par rapport à toutes les histoires possibles (Bielajew et Rogers 1988, Rogers et Bielajew 1990, Andreo 1991, Rogers *et al.* 1995, Kawrakow et Fippel 2000).

3.1. Principe des techniques de réduction de variance

La Figure 7 présente le schéma de principe des techniques de réduction de variance, implémentées dans PENELOPE, appliquées à la simulation du transport des particules dans la tête d'un accélérateur linéaire médical. Il s'agit du « splitting » du rayonnement de freinage, le « splitting » et la roulette russe angulaires ainsi que le « splitting » circulaire.

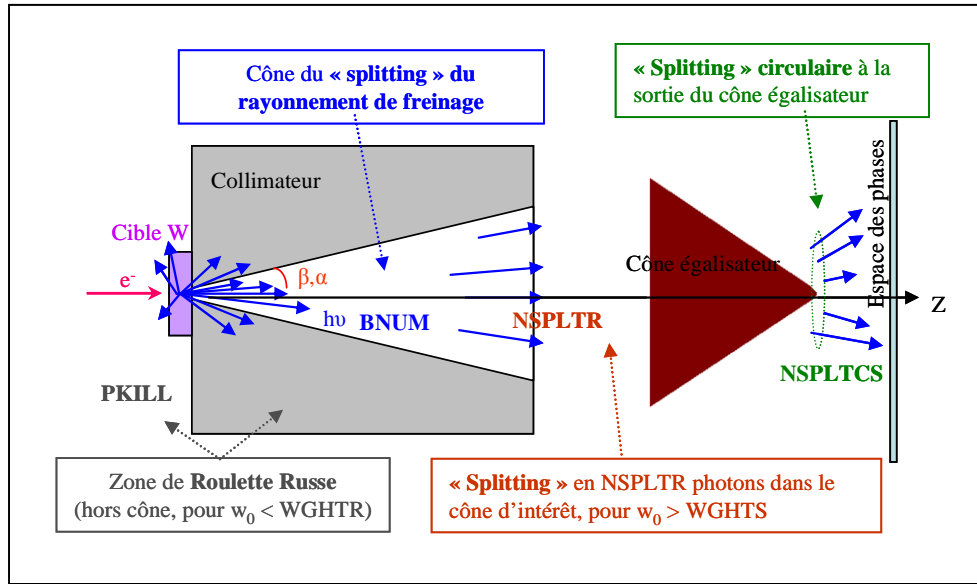


Figure 7 : Schéma de principe des techniques de réduction de variance implémentées dans PENELOPE dans le cas de la simulation des faisceaux issus d'un accélérateur linéaire d'électrons.

3.1.1. « Splitting » du rayonnement de freinage

En présence d'une cible de conversion, une technique très efficace de réduction de variance consiste à accroître artificiellement la production des photons de freinage. Il s'agit de la technique du « splitting » du rayonnement de freinage dans la cible (Figures 7 et 8).

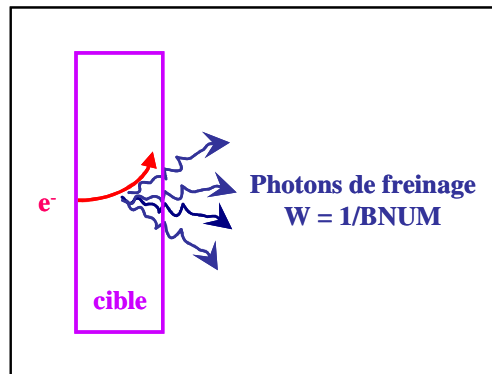


Figure 8 : Schéma de principe de la technique du « splitting » du rayonnement de freinage dans la cible.

Lors d'une interaction radiative, les électrons primaires orientés dans un cône d'intérêt de même axe que le faisceau et de demi-angle au sommet β émettront un nombre $BNUM$ de photons, chacun de poids $w = \frac{w_0}{BNUM}$, w_0 étant le poids initial. Par contre, les électrons

orientés en dehors de ce cône, n'émettront qu'un seul photon avec un poids w_0 , comme dans le cas analogue².

Cet algorithme est d'autant plus coûteux en temps de calcul que $BNUM$ est élevé. Il convient donc de l'utiliser avec prudence. Sa bonne utilisation a pour conséquence d'obtenir une efficacité de simulation accrue grâce au grand nombre de photons d'énergie et orientation différentes, générés par un seul électron source.

3.1.2. « Splitting » et roulette russe angulaires

Le « splitting » et la roulette russe angulaires (Figure 7) sont deux méthodes de réduction de variance généralement associées dans les problèmes où l'intérêt est localisé dans une région délimitée. L'idée est de favoriser le flux de rayonnement vers la région d'intérêt et de le défavoriser en dehors de cette zone. La réduction de variance s'effectue en modifiant le poids des particules afin de garder le résultat final inchangé.

La roulette russe consiste à tuer aléatoirement, avec une probabilité donnée, certains photons d'intérêt moindre. Les photons de freinage ayant un poids initial w_0 inférieur à une valeur $WGHTR$ fixée par l'utilisateur et émis en dehors d'un cône d'intérêt de même axe que le faisceau et de demi-angle au sommet α sont tués avec une probabilité $Pkill$ ($0 < Pkill < 1$). S'ils survivent, les photons poursuivent normalement leur parcours avec un

$$\text{poids } w = \frac{w_0}{1 - Pkill}.$$

Au contraire, la technique du « splitting » favorise les événements utiles. Le photon de freinage ayant un poids initial w_0 supérieur à une valeur $WGHTS$ fixée par l'utilisateur et émis dans le cône d'intérêt est splitté en $NSPLTR$ ($NSPLTR > 1$) photons équivalents, avec chacun

$$\text{le poids } w = \frac{w_0}{NSPLTR} \text{ et } NSPLTR = 1 + INT\left(\frac{w_0}{WGHTS}\right).$$

Un choix judicieux des paramètres liés à ces deux techniques a pour conséquence d'obtenir un gain de temps accru grâce à l'élimination de $100 \cdot Pkill$ % des histoires ayant trait à des

² Une simulation est dite « analogue » lorsqu'aucune technique de réduction de variance n'est employée.

photons émis vers le collimateur ou rétrodiffusés et au grand nombre de photons générés par le « splitting » dans la zone d'intérêt.

3.1.3. « Splitting » circulaire

Dans le cas d'une géométrie présentant une symétrie de révolution autour d'un axe (généralement l'axe du faisceau), la particule de type *KPAR* ayant un poids initial w_0 supérieur à une valeur *WGHTCS* fixée par l'utilisateur, est splittée *NSPLTCS* fois à la sortie du dernier volume de la tête d'irradiation présentant cette symétrie (par exemple le cône égalisateur). Les particules résultantes, chacune de poids $w = \frac{w_0}{NSPLTCS}$ seront réparties uniformément sur un cercle dans le plan orthogonal à l'axe de symétrie et de rayon lié à la position de la particule courante (Figure 7).

3.1.4. Autres symétries de la tête de l'accélérateur

Lorsque la géométrie étudiée présente une symétrie axiale, l'utilisation de cette propriété permet un gain de temps de calcul considérable (Salvat *et al.* 2006). L'espace des phases obtenu lors d'une première simulation peut en effet être dupliqué en considérant, pour chaque particule de coordonnées (x, y, u, v) , ses symétriques $(-x, y, -u, v)$, $(x, -y, u, -v)$, $(-x, -y, -u, -v)$ avec (Oz) l'axe d'irradiation, (Ox) et (Oy) les axes perpendiculaires à l'axe d'irradiation, u et v les cosinus directeur suivant (Ox) et (Oy) . Cette méthode permet d'utiliser quatre fois l'information d'une particule et donc de quadrupler le PSF et de gagner ainsi un facteur 4 sur le temps de calcul du PSF. Cependant, cette méthode n'étant pas à proprement parler une technique de réduction de variance, elle ne fera pas l'objet d'une évaluation dans ce chapitre.

Dans les prochains chapitres, cette méthode sera utilisée dans la simulation des faisceaux d'électrons.

3.2. Efficacité d'une simulation

Afin d'évaluer les performances des techniques de réduction de variance dans une simulation, il est courant d'utiliser la notion d'efficacité ε . L'efficacité ε d'une simulation permet de comparer les performances de deux méthodes différentes et d'estimer le gain de temps apporté par une méthode pour obtenir une variance donnée (ou à l'inverse, estimer la

réduction de l'incertitude statistique associée à la grandeur simulée pour un temps de calcul donné). L'efficacité est définie par la relation :

$$\varepsilon = \frac{1}{\sigma^2 T} \quad (\text{Eq. 3})$$

où σ^2 représente la variance sur l'estimation et T le temps de calcul.

A l'exception du début de calcul, où l'on doit s'attendre à des fluctuations statistiques, σ^2 varie approximativement comme $1/N$, N étant le nombre d'histoires simulées. Ce dernier étant proportionnel à T , ε devrait donc rester à peu près constante au cours du temps. Pour un temps de calcul donné, l'erreur relative σ varie comme $1/\sqrt{\varepsilon}$ et pour la diviser d'un facteur 2, il faudra accroître ε ou le temps de calcul par un facteur 4.

Dans le cas d'un modèle d'accélérateur linéaire, l'efficacité de la simulation est généralement définie en regard de la distribution de la dose absorbée dans le fantôme qui est la quantité d'intérêt. Dans cette étude, plusieurs indicateurs ont été utilisés pour mesurer l'apport des techniques de réduction de variance introduites dans le code PENELOPE :

- L'efficacité de la simulation a été calculée de deux manières différentes pour évaluer l'apport des techniques de réduction de variance (1) sur le calcul de la dose absorbée sur l'axe et (2) sur le calcul des profils transverses. Dans le premier cas, σ^2 représente la moyenne des variances locales de la dose absorbée entre 50 % et 100 % de la dose maximale sur l'axe dans un fantôme homogène. Dans le second cas, σ^2 représente la moyenne des variances locales sur la dose absorbée dans la partie centrale du profil (entre 90 % et 100 % de la dose maximale) dans le fantôme homogène.
- Deux autres indicateurs relatifs au calcul du PSF ont été également utilisés. Le premier concerne le nombre de particules créées dans le PSF par seconde de calcul. Cet indicateur indique l'efficacité des techniques de réduction de variance à produire d'avantage de particules pour un électron primaire simulé. Le second concerne l'information relative à l'incertitude globale (I_g) sur le spectre en énergie des particules présentes dans le PSF :

$$I_g = \sqrt{\sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k^2}{F_k^2}} \quad (\text{Eq. 4})$$

où σ_k^2 est la variance de la fréquence F_k d'obtenir N_k particules dans la $k^{\text{ième}}$ tranche d'énergie.

3.3. Evaluation du gain en efficacité de simulation

Une partie de notre travail a consisté à optimiser les paramètres liés aux techniques de réduction de variance, implémentées dans PENELOPE, afin d'obtenir le meilleur gain sur le temps de calcul. Une fois cette optimisation réalisée, ces techniques ont été validées en vérifiant qu'elles n'introduisaient aucun biais dans les résultats obtenus.

Le bilan en terme de gain en temps de calcul a été fourni pour l'ensemble de ces techniques, à savoir le « splitting » du rayonnement de freinage, le « splitting » et la roulette russe angulaires ainsi que le « splitting » circulaire. Les simulations ainsi réalisées ont permis de déterminer les paramètres permettant d'obtenir le résultat recherché avec une variance minimale en un temps donné.

Différentes valeurs des paramètres associés à ces techniques ont été testées. Il s'agit de :

- *BNUM* et β relatifs au « splitting » du rayonnement de freinage,
- *Pkill*, α et *WGHTR* associés à la roulette russe angulaire,
- *WGHTS* lié au « splitting » angulaire,
- *NSPLTCS* et *WGHTCS* correspondants au « splitting » circulaire.

Cette étude a été menée dans le cas du faisceau de photons de 12 MV de l'accélérateur Saturne 43 (Figure 1) en considérant un calcul direct avec PENELOPE de la dose absorbée dans l'eau depuis la tête d'irradiation et en enregistrant le PSF à l'entrée de la cuve. Des voxels cubiques de taille de côté de 5 mm ont été choisis dans la cuve à eau.

Tableau 1 : Valeur des paramètres associés aux techniques de réduction de variance pour les cas testés.

Cas	BNUM	Pkill	WGHTR	WGHTS	NSPLTCS	WGHTCS
1				analogue		
2	10	0,75	2	-	-	-
3	10	0,5	2	-	-	-
4	10	0,75	2	9.10^{-2}	-	-
5	20	0,75	2	4.10^{-2}	-	-
6	50	0,75	2	10^{-2}	-	-
7	80	0,75	2	9.10^{-3}	-	-
8	100	0,75	2	9.10^{-3}	-	-
9	100	0,75	2	9.10^{-3}	5	10^{-3}
10	100	0,75	2	9.10^{-3}	15	10^{-3}
11	100	0,75	2	9.10^{-3}	25	10^{-3}

Un grand nombre de tests a été réalisé avec le code PENELOPE pour un même temps de calcul fixé à deux jours sur deux processeurs de calcul. Le Tableau 1 regroupe les valeurs des paramètres de simulation des différents cas testés.

Dans un premier temps, certains paramètres ont été fixés à partir des variables physiques choisies dans notre étude. En effet, compte tenu de l'énergie des électrons primaires (12 MeV), et compte tenu du champ d'irradiation considéré (ici un champ de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ à 100 cm de la source), les angles α et β ont été choisis égaux à 5° (valeur légèrement supérieure à $\arctan(5/100)$). Il aura suffi de vérifier que ce choix n'entraîne pas de biaisage.

Concernant la possibilité de multiplier les particules (*BNUM* et *NSPLTCS*), plusieurs valeurs ont été testées afin de déterminer leur influence et la limite à choisir. Ces choix ont un impact immédiat sur les valeurs des poids *WGHTS* et *WGHTCS*. En effet, on peut estimer que la presque totalité des photons présents dans le cône aura subi le « splitting » du rayonnement de freinage, et aura donc un poids égal à $1/BNUM$. Le poids *WGHTS* à partir duquel on applique le « splitting » a donc été choisi en conséquence (cas 4-8). Le raisonnement est identique pour le poids *WGHTCS* à partir duquel on applique le « splitting » circulaire (cas 9-11).

Concernant le poids *WGHTR*, il doit être choisi de façon à ne pas appliquer plusieurs fois la roulette russe à la même particule et de voir ainsi son poids trop augmenter en cas de survie.

Pour la probabilité *Pkill* de tuer une particule à la roulette russe, les deux valeurs 0,5 et 0,75 ont été testées (cas 2 et 3).

Le Tableau 2 donne la valeur des quatre indicateurs de performance étudiés et les compare au cas analogue pour l'ensemble des cas de simulation testés. L'analyse des résultats de ce tableau met en évidence les constatations suivantes :

- La simulation avec une valeur de *Pkill* égale à 0,75 (cas 4) est environ 3 fois plus efficace que la simulation avec une valeur de *Pkill* égale à 0,5 (cas 3), ceci grâce à l'élimination d'un nombre plus élevé d'histoires dans le cas 4 ayant trait à des photons émis en dehors de la région d'intérêt. Il est important de préciser que ces résultats ont été obtenus dans le cas du faisceau de photons de 12 MV. Pour cette énergie, les photons de freinage, créés dans la cible, sont émis préférentiellement vers l'avant. L'efficacité de la roulette russe devrait être meilleure à basse énergie puisqu'un nombre plus élevé de photons émis en dehors de la zone d'intérêt subira la roulette russe.

- L’efficacité de la simulation augmente avec l’utilisation de la technique du « splitting » angulaire (cas 2 et 4) grâce à un nombre plus grand de photons générés dans le champ d’intérêt.
- L’efficacité de la simulation augmente avec la valeur de *BNUM* (cas 4-8) grâce à un nombre plus grand de photons générés. Cette augmentation devient plus lente à partir de *BNUM* égal à 80. Il n’est donc pas utile de prendre une valeur supérieure à 100.
- L’efficacité de la simulation augmente avec la valeur de *NSPLTCS* (cas 9-11) grâce à un nombre plus grand de photons générés.
- L’intégralité des algorithmes de réduction de variance présents dans le code PENELOPE conduit à un gain en efficacité d’un facteur supérieur à 500 sur le profil de dose en profondeur (sur l’axe) et supérieur à 800 sur le profil transverse de dose (en dehors de l’axe).
- En utilisant les méthodes de réduction de variance, le nombre de particules créées dans le PSF par électron source par seconde peut être jusqu’à plus de 1600 fois supérieur !
- L’incertitude globale (I_g) sur le spectre est inférieure dans les cas où l’on met en œuvre les méthodes de réduction de variance (jusqu’à dix fois plus faible pour un temps de calcul identique).

Tableau 2 : Evaluation du gain en performance relatif au cas analogue pour les cas de simulation testés.

Cas*	Temps de calcul ($\times 10^5$ sec)	Nombre d’histoires ($\times 10^7$)	Gain par rapport au cas analogue en terme de :			
			Efficacité sur l’axe	Efficacité sur le profil transversal	Nombre de particules créées dans le PSF/sec	Incertainitude globale (I_g)
1	1,73	2,64	1	1	1	1
2	1,73	3,52	4,0	3,5	9,2	0,3
3	1,73	3,08	5,1	5,3	8,1	0,3
4	1,73	3,19	17,8	13,8	20,7	0,1
5	1,73	2,9	26,5	27,1	35,9	0,1
6	1,73	1,72	43,8	36,9	79,3	0,2
7	1,73	1,59	51,7	49,8	85,0	0,2
8	1,73	1,43	58,2	49,2	90,8	0,2
9	1,73	1,33	218,1	118,3	422,4	0,1
10	1,73	1,18	446,0	374,3	1121,8	0,1
11	1,73	1,05	529,5	848,9	1660,7	0,1

* les paramètres de simulation utilisés dans chaque cas sont détaillés dans le Tableau 1.

A titre d'illustration, la Figure 9 illustre les profils de dose en profondeur et en latéral (à 10 cm de profondeur dans l'eau) obtenus pour les deux cas extrêmes (cas 1 et 11) du Tableau 1 dans une cuve à eau de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ placée à 90 cm de la cible. Pour un temps de calcul identique, on peut remarquer les différences de statistique obtenues et conclure quant à l'efficacité des algorithmes implémentés.

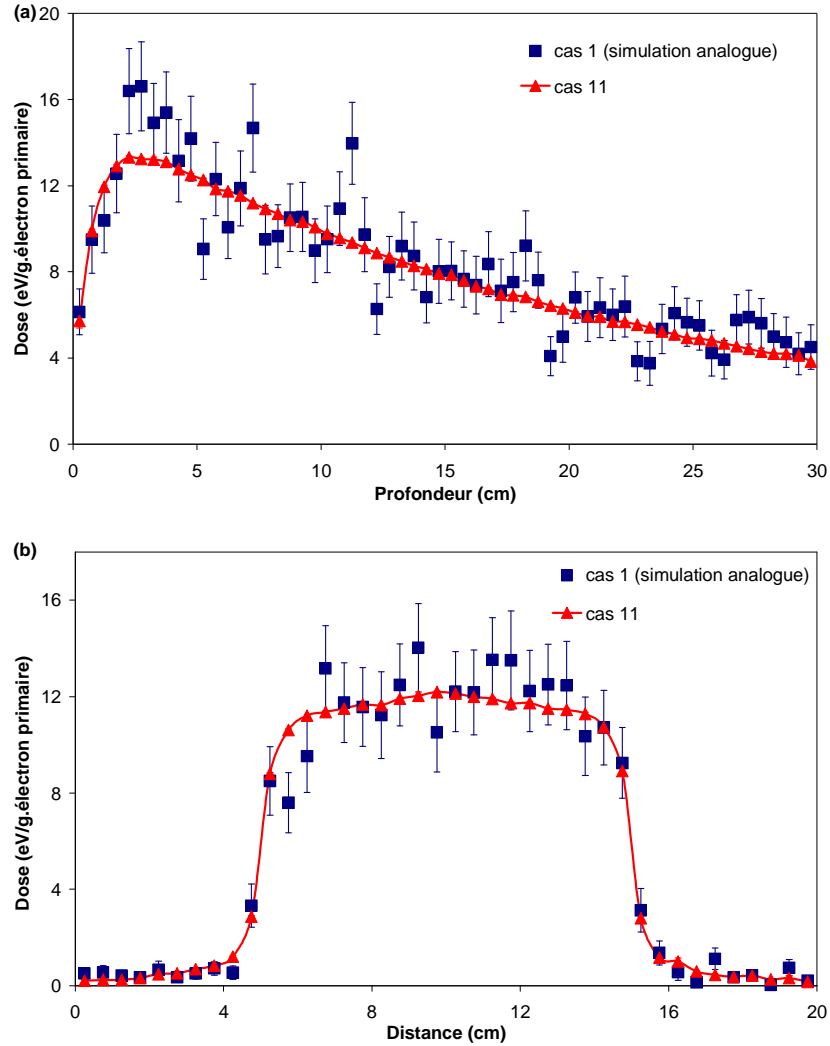


Figure 9 : Comparaison des courbes de dose absorbée sur l'axe (a) et profils de dose (b) pour les cas de simulation 1 et 11 présentés en Tableau 1 (pour des temps de calcul identiques).

Dans les prochains chapitres, ces techniques de réduction de variance seront utilisées pour simuler les faisceaux de photons de haute énergie. Les valeurs des paramètres retenues sont celles correspondant au meilleur résultat obtenu en terme de gain en temps de calcul : $BNUM = 100$, $WGHTR = 2$, $Pkill = 0,75$, $WGHTS = 9 \cdot 10^{-3}$, $WGHTCS = 10^{-3}$, $NSPLTCS = 25$. Les angles α et β dépendent de la configuration et sont donc à optimiser en fonction de la taille du champ.

3.4. Validation des techniques de réduction de variance

Les techniques de réduction de variance consistent en réalité à « biaiser » la physique en fonction de critères d'efficacité. Il est donc nécessaire de vérifier que ces méthodes ne conduisent pas à des erreurs sur les résultats du calcul MC.

Dans cette étude, les différentes techniques introduites dans le code PENELOPE ont été testées par comparaison des spectres en énergie des particules à la sortie de la tête d'irradiation et des distributions de dose calculés avec les techniques de réduction de variance à ceux obtenus avec une simulation analogue. Ce travail a été mené en simulant le faisceau de photons de 12 MV, de champ d'irradiation $10 \times 10 \text{ cm}^2$, issu de l'accélérateur Saturne 43 (représenté sur la Figure 1).

La Figure 10 montre les spectres en énergie des photons obtenus à la sortie de la tête de l'accélérateur à 90 cm de la cible. Les résultats des simulations avec et sans réductions de variance sont comparés. On constate que les écarts observés entre les deux simulations sont inférieurs à l'incertitude statistique associée aux résultats.

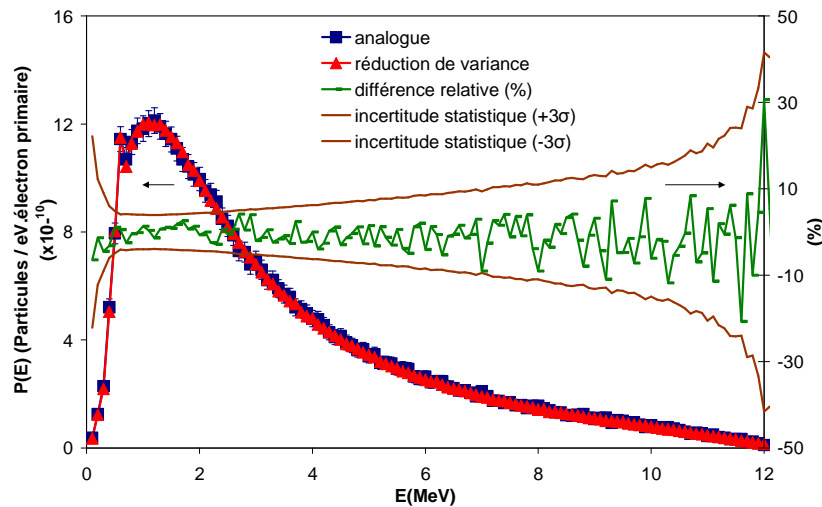


Figure 10 : Spectres en énergie des photons à 90 cm de la cible calculés avec et sans réductions de variance.

La différence relative entre les deux distributions ainsi que les incertitudes statistiques associées aux calculs sont représentées sur l'axe des ordonnées de droite.

De la même façon, les profils de dose en profondeur et en latéral (à 10 cm de profondeur) ont été calculés avec et sans réductions de variance dans une cuve à eau de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ placée à 90 cm de la cible. Des conclusions identiques peuvent être faites à partir des résultats obtenus et présentés dans la Figure 11. Il est important de noter que les incertitudes

statistiques illustrées sur cette figure prennent en compte le calcul analogue qui lui est donné avec une incertitude élevée pour des raisons de temps de calcul limité.

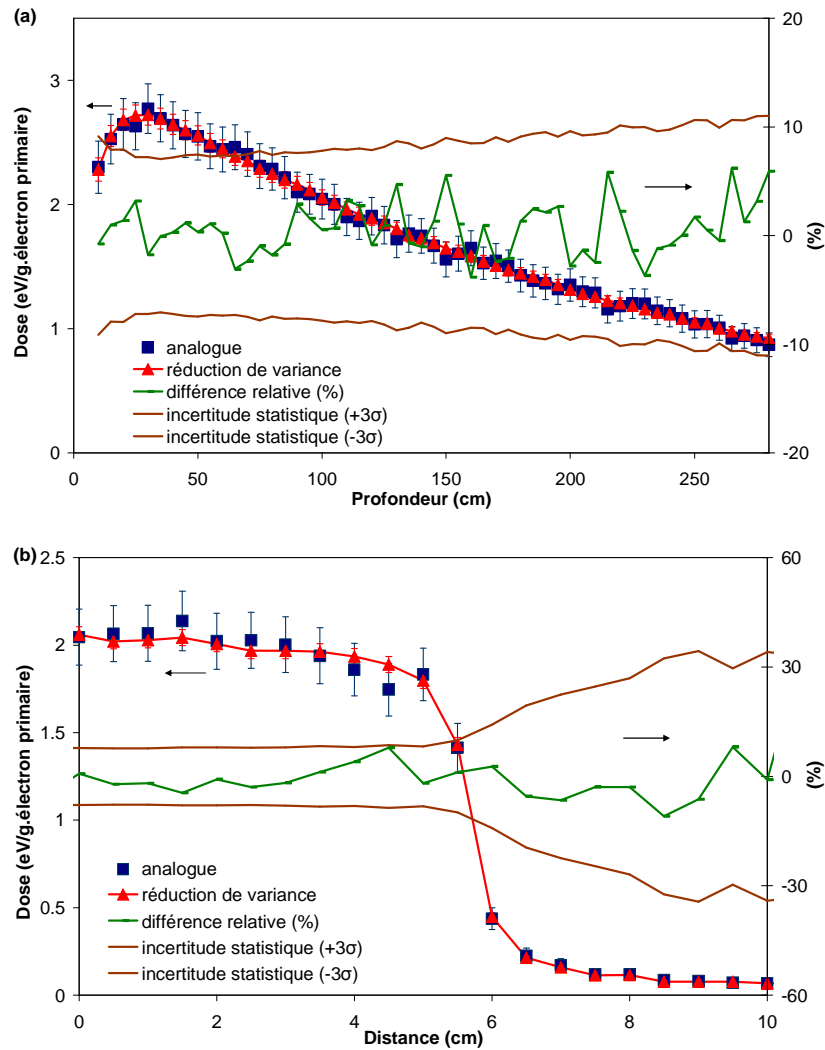


Figure 11 : Courbes de dose absorbée sur l'axe (a) et profils de dose (b) calculés avec et sans réductions de variance. La différence relative entre les distributions ainsi que les incertitudes statistiques associées aux calculs sont représentées sur l'axe des ordonnées de droite.

Les résultats illustrés sur les Figures 10 et 11 permettent de considérer que les algorithmes présents dans PENELOPE ne biaisent pas les résultats.

Ces améliorations du code sont très intéressantes parce qu'elles permettront de calculer plus rapidement des PSF contenant le nombre de particules suffisant pour avoir une statistique correcte sur la dose calculée.

4. Utilisation de la technique du « splitting » en aval du PSF pour le calcul des distributions de dose avec PENFAST

Lors du calcul de la dose, le code PENFAST offre la possibilité d'appliquer la technique du « splitting » qui consiste à réutiliser les particules du PSF un nombre $NSPLIT$ fois. Une particule de poids initial w_o est remplacée par $NSPLIT$ particules identiques de poids $w = w_o / NSPLIT$.

Pour un PSF contenant un nombre fixe de particules, cette technique permet de diminuer la variance sur la dose calculée comme le montre la Figure 12. En contrepartie, le temps de calcul de la dose augmente avec le facteur $NSPLIT$ utilisé. Cette figure présente l'évolution du temps de calcul et de la moyenne des variances locales de la dose absorbée entre 50 et 100 % de la dose maximale sur l'axe en fonction de $NSPLIT$, pour le même nombre de particules dans le PSF. Ces résultats ont été obtenus dans le cas du calcul de la dose absorbée dans l'eau par le faisceau de photons de 12 MV du Saturne 43. Une diminution brutale de la variance avec la valeur de $NSPLIT$ est constatée jusqu'à $NSPLIT$ égal à 10. Cette diminution est ensuite moins rapide à partir de $NSPLIT$ égal à 25. En augmentant le nombre de fois $NSPLIT$ où une particule du PSF est simulée, l'incertitude statistique est améliorée mais tend en effet vers une valeur limite. Cette valeur limite est fixée par le nombre de particules du PSF et est proportionnelle à la racine carrée du nombre d'électrons primaires.

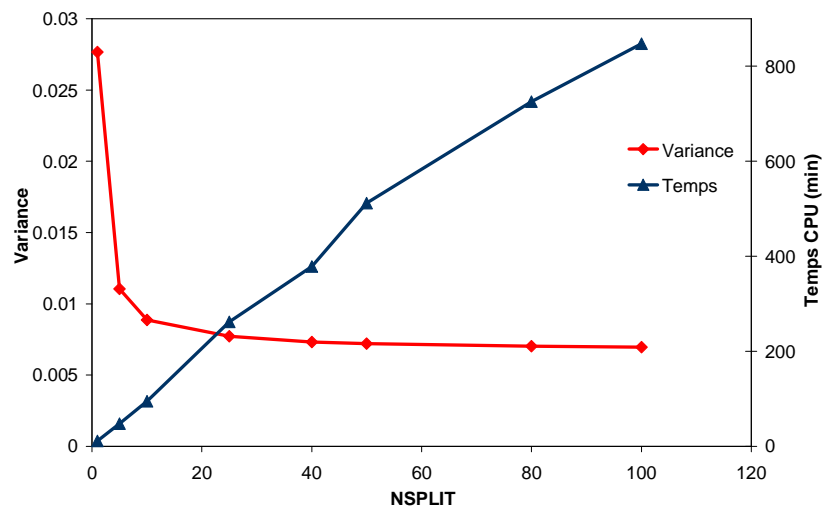


Figure 12 : Evolution de la variance moyenne entre 50 et 100 % de la dose maximale absorbée sur l'axe (axe des ordonnées de gauche) et du temps CPU (axe des ordonnées de droite) en fonction de $NSPLIT$ pour le même nombre de particules dans le PSF.

En conclusion, la technique du « splitting » dans PENFAST permet une amélioration de l'incertitude statistique associée à la dose pour un nombre constant de particules dans le PSF. Il est cependant inutile, dans le présent cas de simulation, de prendre une valeur de *NSPLIT* supérieure à 25 parce que l'amélioration de l'incertitude statistique sur la dose serait moins profitable que l'augmentation du temps de calcul avec le « splitting » (Figure 12).

Il est toutefois important de noter qu'il faut porter une attention particulière quant à l'utilisation de cette technique pour éviter un mauvais échantillonnage des particules dans le PSF qui crée des fluctuations dans les distributions de dose calculées. En effet, si nous considérons le cas 1 de calcul de dose avec un nombre donné de particules dans le PSF sans utiliser la technique du « splitting » (*NSPLIT* égal à 1) et le cas 2 avec n fois moins de particules dans le PSF et un facteur *NSPLIT* égal à n , le Tableau 3 montre que le cas 2 conduit à une variance de dose plus élevée que le cas 1, et ceci pour un temps de calcul de dose identique.

Tableau 3 : Variation de la variance moyenne entre 50 et 100% de la dose maximale absorbée sur l'axe en fonction du nombre de particules dans le PSF et du facteur *NSPLIT*.

Nombre de particules dans le PSF (millions)	NSPLIT	Variance
65	1	$9,64.10^{-4}$
13	5	$1,24.10^{-3}$
6,5	10	$1,62.10^{-3}$
4,3	15	$2,10.10^{-3}$
3,3	20	$2,52.10^{-3}$
1,3	50	$4,66.10^{-3}$
0,65	100	$8,56.10^{-3}$

Dans les prochains chapitres, la technique du « splitting » sera utilisée en mode photon pour améliorer la variance sur la dose calculée par suite de la limitation sur la taille de mémoire de stockage des PSF. Une valeur de *NSPLIT* égale à 25 a été retenue.

La Figure 13 montre les courbes de profil de dose en profondeur et en latéral obtenues avec des valeurs croissantes du paramètre *NSPLIT* allant de 1 (c'est-à-dire la technique du « splitting » est désactivée) jusqu'à 100, en utilisant le même PSF. Cette figure montre qu'en partant d'un même nombre de particules dans le PSF, la technique du « splitting » n'introduit pas de biais sur le calcul de la dose puisque les différentes distributions sont comparables aux incertitudes statistiques près.

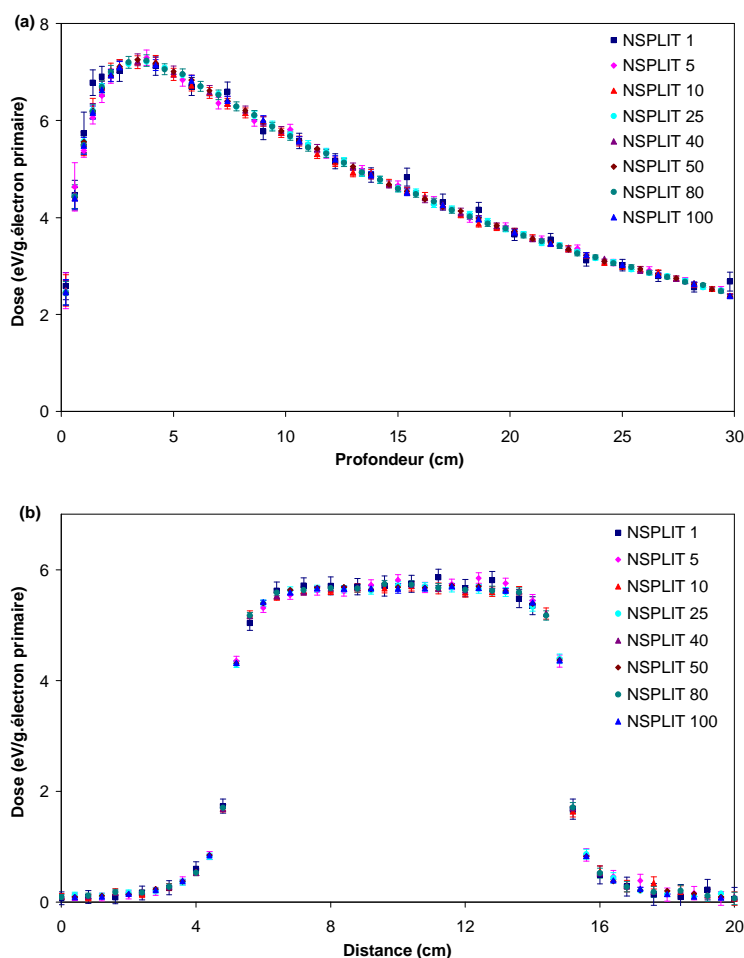


Figure 13 : Courbes de dose absorbée sur l'axe (a) et profils de dose (b) calculés avec des valeurs croissantes de *NSPLIT*.

5. Conclusions

L'intérêt de recourir aux méthodes statistiques de MC pour obtenir une meilleure précision dans le calcul du dépôt de dose n'est plus à démontrer. L'objectif de rendre leur utilisation accessible en clinique en réduisant le temps de calcul a été prouvé et peut être largement atteint en ayant les moyens informatiques nécessaires.

La parallélisation des deux codes PENELOPE et PENFAST permet de réduire le temps de calcul d'un facteur proportionnel au nombre de processeurs utilisés. Elle permet d'envisager l'obtention des temps de calcul, souhaités en routine clinique, en mettant en œuvre les moyens de calculs suffisants. De plus, la méthode de parallélisation de ces deux codes a été validée en montrant qu'elle n'introduisait aucun biais dans les résultats obtenus aux incertitudes statistiques près.

Les algorithmes de réduction de variance, présents dans le code PENELOPE, utilisés pour le calcul des PSF, permettent un gain d'un facteur 500 au moins sur le temps de calcul. Ce résultat permettra de calculer plus rapidement des PSF, et ceci sans biaiser les résultats.

L'étude menée dans ce chapitre a permis de mettre en évidence les performances des codes MC PENELOPE et PENFAST, moyennant l'utilisation de techniques de réduction de variance et leur parallélisation avec l'interface MPI. Les prochaines étapes indispensables, seront la validation en conditions métrologiques puis en conditions cliniques de la physique du code PENFAST intégré dans le TPS.

Chapitre III

MISE AU POINT D'UNE NOUVELLE METHODE DE REPRESENTATION DU SPECTRE EN ENERGIE DES ELECTRONS PRIMAIRES D'UN ACCELERATEUR LINEAIRE

1. Introduction

Afin de calculer les distributions de dose avec le code MC PENFAST, il faut tout d'abord calculer avec le code MC PENELOPE le PSF à la sortie de la tête de l'accélérateur linéaire d'électrons. Deux étapes sont alors nécessaires : (1) la modélisation géométrique de la tête d'irradiation et (2) la détermination des caractéristiques du faisceau d'électrons primaires à la sortie de la chambre de déviation magnétique. Malheureusement, les données relatives à l'accélérateur linéaire ne sont pas toujours connues avec précision. Par exemple, les caractéristiques du faisceau d'électrons primaires (distributions énergétique, spatiale et angulaire de ces électrons) sont relativement mal connues et difficilement mesurables.

Il n'existe actuellement aucune méthode simple permettant de déterminer le spectre en énergie continu réel des électrons primaires en raison du filtrage en énergie des électrons par le champ magnétique à la sortie de la section accélératrice. L'objectif est donc de trouver un spectre mathématique qui permet d'obtenir la bonne distribution de dose. Dans ce contexte, nous avons donc cherché une méthode qui détermine un spectre discret avec un nombre limité d'énergies. Cette représentation spectrale induit un dépôt d'énergie (rendement en profondeur et profil de dose) qui correspond à la réalité expérimentale.

Ce chapitre propose donc une nouvelle méthode d'ajustement de la distribution énergétique initiale d'un accélérateur linéaire. Il s'agit de déterminer une représentation discrète du spectre en énergie des électrons primaires en utilisant à la fois les simulations MC PENELOPE et le principe de l'ajustement par la méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité (Lawson et Hanson 1974) dans le but d'adapter aux mieux les distributions de dose calculées à celles mesurées. Cette nouvelle méthode a été appliquée à la simulation des faisceaux issus des accélérateurs linéaires Saturne 43 du LNHB et Primus K-

CLASS de Siemens installé au CAL. L'index gamma a été utilisé pour évaluer la concordance entre les distributions de dose simulées et mesurées.

La première partie de ce chapitre donne un bref aperçu des travaux antérieurs sur la simulation MC des faisceaux issus des accélérateurs linéaires, en insistant sur la sensibilité des résultats aux paramètres initiaux (distributions énergétique, spatiale et angulaire des électrons primaires) et aux détails de la géométrie de la tête d'irradiation. La deuxième partie décrit la méthode mise au point pour déterminer les paramètres du faisceau d'électrons primaires. Les deux dernières parties abordent la validation de cette méthode appliquée pour la simulation respective des faisceaux issus des accélérateurs Saturne 43 et Primus.

2. Etat de l'art

2.1. Sensibilité des distributions de dose aux paramètres de la source

La sensibilité des distributions de dose aux paramètres du faisceau initial d'un accélérateur linéaire a d'ores et déjà fait l'objet de nombreuses études. L'influence de ces paramètres sur les distributions de dose dépend à la fois du type de l'accélérateur, de la nature du faisceau (électron ou photon) et de la taille du champ.

Parmi les différentes études antérieures, on distingue celles de Lovelock *et al.* (1995), Ma et Jiang (1999), Sheikh-Bagheri *et al.* (2000), Lin *et al.* (2001), Bjork *et al.* (2002), Sheikh-Bagheri et Rogers (2002a et b), Verhaegen et Seuntjens (2003), Pena *et al.* (2004), Tzedakis *et al.* (2004), Faddegon *et al.* (2005), Fix *et al.* (2005), Schreiber et Faddegon (2005), Mesbahi *et al.* (2006) et Wang et Leszczynski (2007) qui ont porté sur différents types d'accélérateurs (Varian, Siemens et Elekta) et différents points d'énergie en modes électron et photon. Il ressort de ces travaux que quatre principaux paramètres caractérisant la source d'électrons primaires peuvent avoir une influence sur les distributions de dose : l'énergie moyenne, la distribution en énergie, la distribution spatiale et la distribution angulaire du faisceau d'électrons primaires.

2.1.1. Energie moyenne

L'énergie moyenne des électrons primaires est le paramètre qui a la plus forte influence sur les rendements en profondeur. La sensibilité des rendements en profondeur à ce paramètre est de l'ordre de 200 keV pour les faisceaux d'électrons (c'est-à-dire qu'un changement de

l'énergie initiale de 200 keV correspond à un changement de 1 mm du parcours pratique du faisceau d'électrons dans l'eau).

Cette sensibilité est plus faible pour les faisceaux de photons.

Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a et b ont étudié l'effet de la modification de ce paramètre sur les profils de dose de grand champ, pour plusieurs points d'énergie photon produits par différents accélérateurs (Elekta, Varian et Siemens). Les résultats montrent qu'une augmentation de l'énergie du faisceau arrondit le profil en diminuant la dose en limite du plateau et dans la pénombre et ceci linéairement en fonction de l'énergie.

Bjork *et al.* (2002), en étudiant les faisceaux d'électrons issus d'un accélérateur Elekta, ont quant à eux montré que les profils de dose sont insensibles aux variations de l'énergie de la source d'électrons primaires.

2.1.2. Distribution en énergie

Pour une énergie moyenne constante des électrons primaires, la modification de la distribution en énergie influence les rendements en profondeur. Certains auteurs ont noté des modifications au niveau de la dose locale allant jusqu'à 1,5 % pour un faisceau de photons de 18 MV (Verhaegen et Seuntjens 2003).

D'autres études sur des faisceaux de photons (Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a et b) et d'électrons (Bjork *et al.* 2002), ont montré que la zone d'équilibre électronique (build-up) est sensible à la distribution en énergie du spectre des électrons primaires. Une légère asymétrie dans la distribution en énergie avait un effet direct sur les courbes de rendements aux faibles profondeurs.

Au niveau des profils de dose, les effets sont pour la plupart négligeables ou très faibles.

2.1.3. Distribution spatiale

Des études ont montré que les rendements en profondeur, en modes photon (Lin *et al.* 2001, Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a, Tzedakis *et al.* 2004) et électron (Bjork *et al.* 2002), sont insensibles aux variations de la distribution spatiale du faisceau d'électrons primaires. Ceci est justifié par le fait que la dose le long de l'axe est principalement déposée par des particules à proximité de l'axe.

Au niveau de l'influence sur les profils de dose, les résultats des études effectuées par Sheikh-Bagheri et Rogers (2002a et b), Tzedakis *et al.* (2004) et Mesbahi *et al.* (2006) en mode photon montrent que, pour des grands champs, l'augmentation du diamètre de la source est liée à une diminution des valeurs de dose hors-axe. Ce comportement s'explique par le fait que la région centrale du profil est directement soumise aux photons issus du faisceau.

Pour les faisceaux d'électrons, l'influence de ce paramètre sur les distributions de dose simulées a été étudiée par Bjork *et al.* (2002) pour un accélérateur Elekta. Il ressort de ces travaux que les profils de dose sont insensibles aux variations de la distribution spatiale des électrons primaires.

2.1.4. Distribution angulaire

Pour les faisceaux de photons, il a été prouvé qu'une modification de la divergence du faisceau d'électrons primaires n'a aucun effet sur les rendements en profondeur et très peu d'effets sur les profils de dose (Sheikh-Bagheri *et al.* 2000, Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a et b). Au niveau des profils des grands champs, une divergence de 1° peut entraîner une diminution inférieure à 1 % des doses hors-axe pour des photons de 18 MV issus d'un accélérateur Varian (Sheikh-Bagheri et Rogers 2002b).

Pour les faisceaux d'électrons, Bjork *et al.* (2002) ont montré que l'influence de la distribution angulaire du faisceau sur les résultats de MC est très faible.

2.2. Sensibilité des distributions de dose aux détails géométriques de la tête de l'accélérateur

En ce qui concerne l'influence des différents composants géométriques de la tête d'irradiation (dimensions, compositions atomiques et densités) sur les résultats de la simulation MC, deux cas peuvent être distingués selon qu'il s'agit d'un faisceau de photons ou d'électrons.

En mode photon, le faisceau d'électrons primaires frappe une cible de numéro atomique élevé afin de produire des photons par rayonnement de freinage. Le faisceau de photons traverse ensuite un cône égalisateur pour équilibrer la distribution en dépôt d'énergie. Des études antérieures (Chaney *et al.* 1994, Ding 2002, Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a, Libby *et al.* 1999, Bramoullé 2000, Franchisseur 2007) ont montré que les profils de dose sont très sensibles à la forme, la composition et la densité du cône égalisateur. Par ailleurs, l'atténuation du faisceau de photons par la chambre moniteur et le miroir était négligeable. Ils

ont montré aussi que les mâchoires de collimation n'ont pas un effet significatif sur les distributions énergétique et angulaire des photons.

En mode électron, les accélérateurs utilisent généralement une paire de diffuseurs fins (pour aplatir le faisceau avec un minimum de contamination par des photons de freinage) et un applicateur avec un insert (pour définir la taille du champ). De nombreuses études (Ma et Jiang 1999, Bieda *et al.* 2001, Faddegon *et al.* 2005, Schreiber et Faddegon 2005) ont montré que les distributions de dose (rendements en profondeur et profils de dose) sont très sensibles aux éléments que le faisceau traverse, en particulier la position et la composition des diffuseurs et de la chambre moniteur (si elle a des parois épaisses). Bieda *et al.* 2001 ont montré que les rendements en profondeur et les profils de dose du faisceau d'électrons de 20 MeV de l'accélérateur Varian sont directement affectés par la distance entre les deux diffuseurs primaire et secondaire et par la largeur du diffuseur secondaire.

2.3. Conclusion

En conclusion, afin d'effectuer une simulation MC précise d'un faisceau issu d'un accélérateur linéaire et d'avoir ainsi des résultats comparables aux mesures expérimentales, deux conditions sont nécessaires :

- Les paramètres géométriques de tous les éléments présents sur la voie du faisceau doivent être rigoureusement respectés suivant les informations fournies par le constructeur.
- Les paramètres du faisceau d'électrons primaires doivent être optimisés avec précision, au cas par cas.

Cette revue de la littérature a montré qu'il y a un grand nombre de paramètres à ajuster afin d'atteindre la précision requise sur le calcul de la dose. Les méthodes existantes d'optimisation de l'ensemble de ces paramètres sont des méthodes empiriques, fondées sur une connaissance a priori de la solution et longues en temps de calcul. Ces méthodes ne permettent pas de trouver une solution unique puisque les différents paramètres ajustés ne sont pas indépendants et se compensent les uns avec les autres.

Dans la suite de ce chapitre, nous proposerons une solution plus systématique et plus rapide de simulation MC des faisceaux.

3. Simulation MC des faisceaux issus des accélérateurs linéaires

Dans cette étude, la simulation MC avec le code PENELOPE d'un faisceau issu d'un accélérateur linéaire, en vue d'obtenir le PSF, a été effectuée en plusieurs étapes.

Au départ, la modélisation géométrique de la tête de l'accélérateur a été effectuée en respectant rigoureusement les caractéristiques des différents éléments fournies par le constructeur.

Ensuite, lors du processus d'optimisation des caractéristiques du faisceau d'électrons primaires, seules l'énergie moyenne, la distribution énergétique et la distribution spatiale ont été optimisées. En effet, étant donné que les études antérieures ont prouvé que l'impact de la divergence du faisceau initial sur les distributions de dose est très faible pour les angles typiques, nous avons assumé que la divergence du faisceau est nulle.

Les paragraphes suivants décrivent le processus de caractérisation du faisceau d'électrons primaires.

3.1. Méthode d'ajustement du spectre initial en énergie d'un accélérateur linéaire

En simulation MC, le spectre en énergie des électrons primaires est souvent assimilé à une distribution énergétique gaussienne. Cette distribution est généralement déterminée en optimisant d'une manière empirique son énergie moyenne, écart-type et fenêtre en énergie. Il s'agit d'essayer, d'une façon itérative, différentes valeurs de ces trois paramètres et de choisir, parmi elles, celles qui permettent d'obtenir des distributions de dose simulées les plus proches de celles mesurées dans une cuve à eau. Cette méthode de caractérisation du faisceau initial manque toutefois de rigueur pour deux raisons. La première puisque l'asymétrie du spectre, implicitement due au fenêtrage en énergie des électrons lors de la déviation magnétique doit être prise en compte. La seconde puisque la solution est empirique et dépend du choix des valeurs testées des trois paramètres qui ne sont pas indépendants.

Dans le cadre de cette étude, nous avons mis au point une nouvelle méthode rigoureuse, méthodique et rapide d'ajustement du spectre initial en énergie d'un accélérateur linéaire. En effet, la dose absorbée dans un milieu répond à la loi d'additivité, autrement dit la dose totale absorbée est égale à la somme des doses absorbées dues aux rayonnements de différentes énergies irradiant le milieu. Cette propriété justifie le choix d'une représentation du spectre énergétique inconnu des électrons primaires d'un accélérateur linéaire à partir des distributions de dose absorbée dans l'eau (milieu de référence en radiothérapie), en utilisant le

principe des moindres carrés (Lawson et Hanson 1974, Björck 1996, Rao *et al.* 1999, Wolberg 2005). Ce principe permet de comparer des données expérimentales à un modèle théorique censé décrire ces données. Dans le cas où la grandeur que l'on cherche à mesurer n'est pas observable et n'apparaît qu'indirectement comme paramètre p d'un modèle théorique, le principe des moindres carrés permet de construire un estimateur de p , qui vérifie l'obtention des critères d'optimisation.

Cette méthode d'ajustement du spectre en énergie des électrons primaires repose, tout d'abord, sur plusieurs simulations du rendement en profondeur dans l'eau réalisées avec le code MC de référence PENELOPE en considérant plusieurs faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques. Les simulations sont effectuées pour le champ de référence $10 \times 10 \text{ cm}^2$ afin de minimiser l'effet des particules diffusées latéralement dans l'eau. Ensuite, le principe des moindres carrés est utilisé pour déterminer une représentation discrète du spectre énergétique des électrons primaires qui permet d'obtenir un rendement en profondeur, reconstruit par combinaison linéaire entre les rendements en profondeur simulés à différentes énergies, se conformant aux mesures expérimentales dans l'eau.

Par conséquent, on définit :

- Le vecteur y qui constitue le rendement en profondeur expérimental, formé d'une colonne et de m lignes. m est égal au nombre de points de mesures correspondant aux différentes profondeurs.
- La matrice E qui est la bibliothèque des rendements en profondeur théoriques calculés avec PENELOPE en considérant l'ensemble des faisceaux initiaux monoénergétiques. Il s'agit d'une matrice de m lignes et de n colonnes. m correspond aux différentes profondeurs de calcul et n correspond aux différentes énergies considérées.
- Le vecteur p de l'intensité recherchée de chaque énergie de la bibliothèque. Il s'agit du spectre en énergie initial inconnu à déterminer par le principe des moindres carrés.

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & \cdot & e_{1j} & \cdot & e_{1n} \\ e_{21} & e_{22} & \cdot & e_{2j} & \cdot & e_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ e_{i1} & \cdot & \cdot & e_{ij} & \cdot & e_{in} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ e_{m1} & e_{m2} & \cdot & e_{mj} & \cdot & e_{mn} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad p = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \cdot \\ p_j \\ \cdot \\ p_n \end{pmatrix} \quad (\text{Eq. 1})$$

Le principe de l'ajustement par les moindres carrés considère que le meilleur estimateur de p est celui qui minimise la somme quadratique des écarts entre les mesures et le modèle théorique (le carré de l'écart pour s'affranchir des résultats négatifs suivant si le point est au-dessus ou en-dessous de la courbe mesurée et ainsi ne tenir compte que de la distance entre les points). Il s'agit de trouver un jeu de paramètres p_j qui minimisent la quantité suivante :

$$S = \sum_{i=1}^m \left(y_i - \sum_{j=1}^n e_{ij} \cdot p_j \right)^2 \quad (\text{Eq. 2})$$

S peut être considérée comme une mesure de la « distance » entre les données expérimentales et le modèle théorique qui prédit ces données. Cette quantité est une mesure de la qualité du modèle et donc de l'efficacité de l'ajustement. Si cette distance est petite, l'ajustement est considéré comme étant bon. A l'inverse, si elle est grande, l'ajustement est mauvais. On considère donc que parmi toutes les courbes possibles qui s'approchent des données expérimentales, celle révélant le meilleur ajustement est celle qui correspond à la valeur S minimale.

On montre que la solution p est telle que (Lawson et Hanson 1974, Björck 1996, Rao *et al.* 1999, Wolberg 2005) :

$$\frac{\partial S}{\partial p_j} = 0, \quad \forall j \quad \text{donc} \quad p = (E^T E)^{-1} \cdot E^T y \quad (\text{Eq. 3})$$

où E^T est la matrice transposée de E et $(E^T E)^{-1}$ est la matrice inverse du produit $E^T E$.

La matrice $E^T E$ est une matrice symétrique (produit de transposée). Elle a un inverse si les vecteurs de E sont distincts. Dans le cas contraire, le déterminant de la matrice $E^T E$ est nul et elle n'est plus inversible, ce qui correspondrait au cas absurde où on n'aurait pris qu'une seule valeur d'énergie pour l'ajustement. Si donc les rendements en profondeur calculés sont distincts, $(E^T E)^{-1}$ existe et est unique. Donc la solution p existe et est unique au sens des moindres carrés (Lawson et Hanson 1974, Björck 1996, Rao *et al.* 1999, Wolberg 2005).

Si les incertitudes associées aux rendements en profondeur mesurés et calculés sont négligeables ou très faibles, le principe des moindres carrés permet de faire des estimations de p sans biais (Pena *et al.* 2007).

Etant donné que les paramètres p_j recherchés correspondent à l'intensité de chaque énergie, leurs valeurs ne peuvent être que positives ou nulles. La détermination du poids optimal de chaque énergie se fait donc selon un algorithme des moindres carrés approprié dit « moindres carrés avec la contrainte de non-négativité » qui trouve l'ensemble des paramètres optimaux

minimisant la distance entre le modèle théorique et les mesures, sous la condition supplémentaire de non-négativité de ces paramètres. Pour mettre en œuvre cette méthode, la fonction *lsqnonneg* (Least Squares with NONNEGativity constraints) du logiciel MATLAB (Lawson et Hanson 1974, MathWorks 2005) a été utilisée. L'annexe C donne une description de l'algorithme utilisé dans cette fonction.

Cette méthode a été testée sur la simulation des faisceaux issus des deux accélérateurs Saturne 43 et Primus. Les résultats de cette étude sont présentés dans les deux dernières parties de ce chapitre.

3.2. Détermination de la taille de la source d'électrons primaires

L'influence de la taille de la source d'électrons primaires sur les profils de dose a été évaluée pour tous les faisceaux étudiés, à savoir les faisceaux de photons de 12 MV et électrons de 18 MeV de l'accélérateur Saturne 43 ainsi que les faisceaux de photons de 25 MV et électrons de 9 MeV de l'accélérateur Primus.

La comparaison des profils de dose calculés avec le code MC PENELOPE dans une cuve à eau, à partir d'une source ponctuelle (diamètre de 0 mm) et circulaire uniforme (diamètre de 1 mm, et 2 mm), est présentée sur la Figure 1a pour le faisceau d'électrons de 18 MeV du Saturne (profondeur de 4,2 cm). La Figure 1b illustre la comparaison pour le faisceau d'électrons de 9 MeV du Primus (profondeur de 2 cm).

Les résultats de cette étude ont montré que la sensibilité des profils de dose à la variation de la taille de la source est très faible, voire négligeable, pour les faisceaux d'électrons étudiés. Une source ponctuelle a donc été utilisée, par la suite, pour le calcul des PSF en mode électron.

Bjork *et al.* (2002) avaient trouvé des résultats similaires en étudiant l'effet de la taille de la source d'électrons primaires sur les profils de dose pour un faisceau d'électrons de 12 MeV, de champ 40×40 cm², issu de l'accélérateur Elekta.

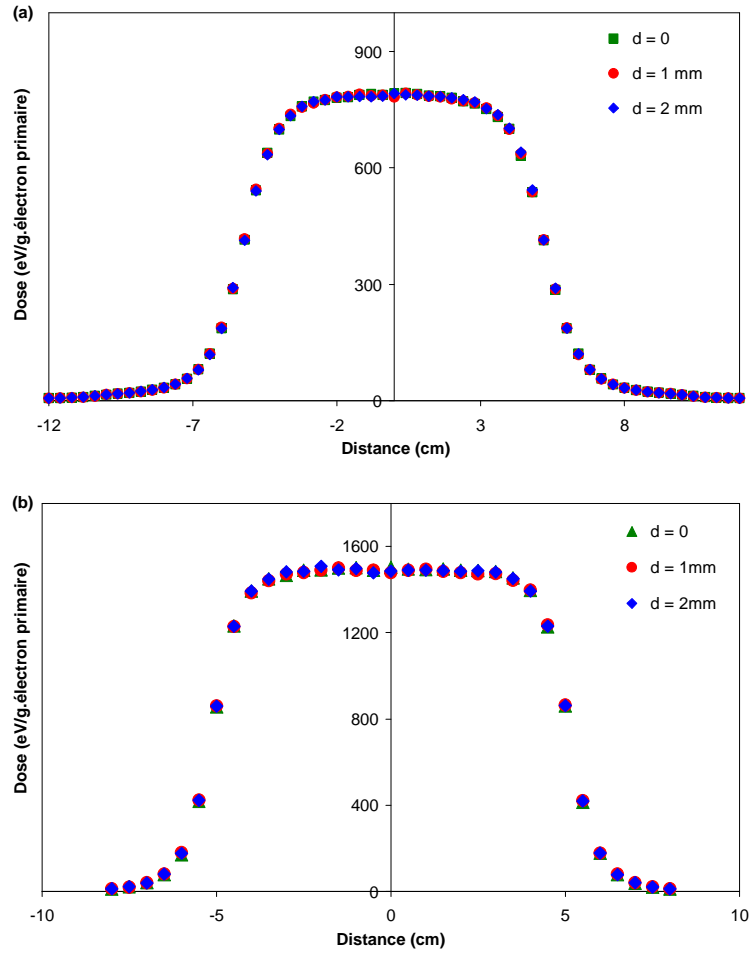


Figure 1 : Comparaison des profils de dose calculés à la profondeur de référence, pour une valeur croissante du diamètre de la source. (a) cas du Saturne 43, électron 18 MeV, champ 10×10 cm².
(b) cas du Primus, électron 9 MeV, champ 10×10 cm².

La même étude a été menée pour évaluer l'influence de la taille de la tâche focale (point d'impact des électrons primaires sur la cible) sur les profils de dose pour les faisceaux de photons.

La comparaison des profils de dose à la profondeur de référence (10 cm dans l'eau), calculés avec différentes tailles de tâche focale, est présentée sur la Figure 2a pour le faisceau de photons de 12 MV (champ 10×10 cm²) du Saturne.

Etant donné que nous disposons des mesures pour le champ 20×20 cm² du mode photon 25 MV du Primus, l'évaluation de l'influence de la taille de la tâche focale a été effectuée pour ce grand champ. En effet, les études antérieures ont montré que les profils de dose sont plus sensibles à la taille de la source pour les grands champs que pour des champs plus petits (Sheikh-Bagheri et Rogers 2002a, Mesbahi *et al.* 2006). La comparaison des profils de dose à la profondeur de référence (10 cm dans l'eau), calculés avec différentes tailles de tâche focale,

est présentée sur la Figure 2b pour le faisceau de photons de 25 MV (champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$) du Primus.

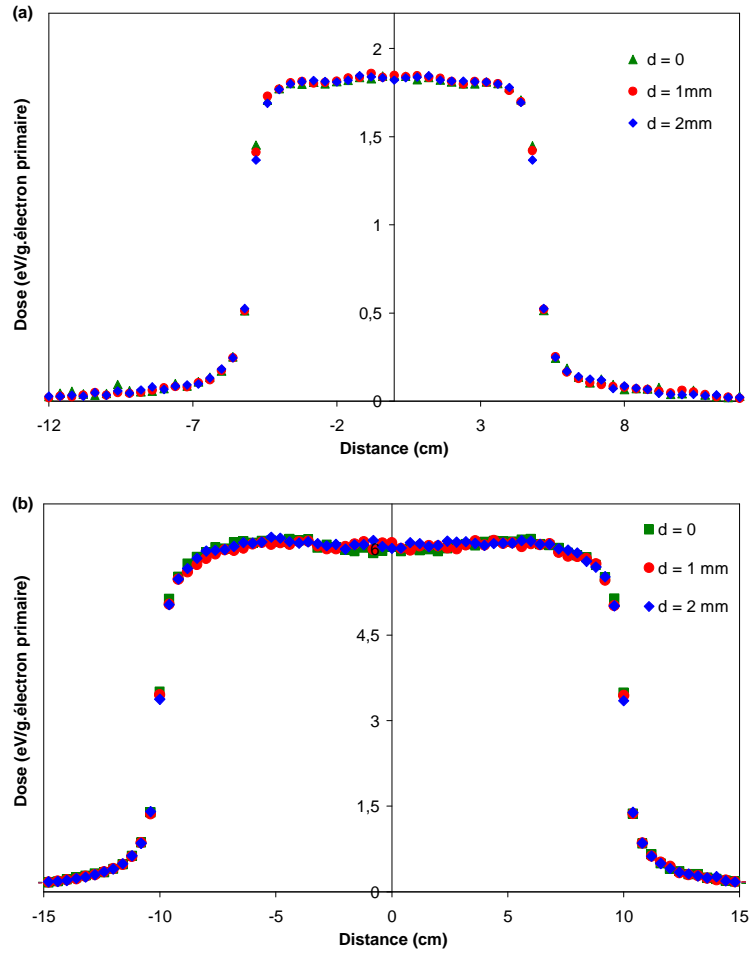


Figure 2 : Comparaison des profils de dose calculés à la profondeur de référence, pour une valeur croissante du diamètre de la source. (a) cas du Saturne 43, photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$. (b) cas du Primus, photon 25 MV, champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$.

Comme pour les faisceaux d'électrons, les résultats montrent une influence très faible de la variation de la taille de la tâche focale sur les profils de dose, pour les faisceaux de photons étudiés. Une source ponctuelle a donc été utilisée, par la suite, pour le calcul des PSF en mode photon.

4. Application aux faisceaux issus de l'accélérateur linéaire Saturne 43

Dans le cadre de la validation expérimentale du code MC PENFAST, deux faisceaux de l'accélérateur Saturne 43 ont été étudiés. Un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV, définissant un champ d'irradiation de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ à 100 cm de la source (cible en mode photon et diffuseur primaire en mode électron), ont été modélisés avec

le programme PENGEOM du code PENELOPE. Les différents éléments de la tête d'irradiation ont été modélisés grâce aux caractéristiques fournies par le constructeur. Les détails de la modélisation géométrique de la tête d'irradiation pour les deux modes étudiés sont fournis dans l'Annexe D.

La simulation MC de la tête de l'accélérateur a pour origine la source d'électrons primaires au niveau d'une fenêtre de sortie en titane sans modéliser la partie d'accélération et de déviation des électrons. En conséquence, les paramètres de la source d'électrons primaires doivent être optimisés. De ce fait, des ajustements sont réalisés en comparant les distributions de dose mesurées et calculées.

4.1. Paramètres de simulation

Les valeurs des paramètres de simulation PENELOPE pour le faisceau de photons (12 MV) ainsi que pour le faisceau d'électrons (18 MeV) sont résumées dans le Tableau 1.

Tableau 1 : Paramètres de simulation PENELOPE des faisceaux de photons de 12 MV et d'électrons de 18 MeV.

Paramètres	12 MV	18 MeV
C1 = C2	0,05	0,05
Wcc (keV) = Wcr (keV)	10	10
Energies de coupure (keV)		
tête d'irradiation (e-, photons, e+)	100, 10, 100	100, 10, 100
cuve à eau (e-, photons, e+)	100, 10, 100	100, 10, 100
Nombre d'électrons primaires	1.10^8	5.10^7
Techniques de réduction de variance		
tête d'irradiation	BNUM*, RR*, SPLIT*, SPLITC*	-
cuve à eau	NSPLIT = 25	-

*BNUM : « Splitting » du rayonnement de freinage, RR : Roulette Russe, SPLIT : « Splitting » angulaire et SPLITC : « Splitting » circulaire. Les valeurs retenues pour ces techniques sont précisées dans le Chapitre II, Paragraphe 3.3.

Les valeurs des paramètres C1 et C2 propres au modèle de diffusion ont été prises égales à 0,05 pour avoir la simulation la plus précise. Les valeurs des deux autres paramètres Wcc et Wcr ont été prises égales à 10 keV. Ces valeurs ont été choisies suivant les recommandations de Salvat *et al.* (2006).

En ce qui concerne les simulations dans la cuve à eau, le choix d'une énergie de coupure de 100 keV pour les électrons et les positons est compatible avec l'épaisseur du volume de détection ($4 \times 4 \times 4 \text{ mm}^3$), la portée d'un électron de 100 keV étant de 0,15 mm dans l'eau.

Les incertitudes statistiques associées aux calculs MC avec PENELOPE sont données à un écart-type (1σ). Pour le faisceau d'électrons, elles sont inférieures à 0,4 % (1σ) dans les régions de forte dose (entre 50 % et 100 % de la dose maximale) et inférieures à 1,3 % (1σ) ailleurs. Pour le faisceau de photons, elles sont inférieures à 0,9 % (1σ) dans les régions de forte dose et inférieures à 3,0 % (1σ) ailleurs.

4.2. Mesures expérimentales

Pour valider la simulation de la tête de l'accélérateur, il est d'usage de comparer les distributions de dose simulées aux mesures expérimentales dans un modèle simple. Pour cela, les rendements en profondeur et les profils de dose ont été mesurés dans une cuve à eau de $30\times30\times30\text{ cm}^3$.

Pour le faisceau d'électrons de 18 MeV, la surface de la cuve a été positionnée à 100 cm de la source. Le faisceau définissait un champ d'irradiation de $10\times10\text{ cm}^2$ à 100 cm de la source.

Les rendements en profondeur ont été mesurés à l'aide d'une CI plate de type NACP-02 (volume sensible de $0,275\text{ cm}^3$). Les profils de dose ont été mesurés à l'aide d'une CI cylindrique de type PTW-31002 (volume sensible de $0,125\text{ cm}^3$) à la profondeur de référence de 4,2 cm suivant le protocole de l'IAEA (2000).

Dans le cas d'un faisceau d'électrons, la variation du spectre électronique avec la profondeur nécessite que les distributions de dose mesurées soient impérativement corrigées du rapport des pouvoirs d'arrêt dans l'eau et dans l'air ($S_{eau,air}$). Les valeurs du facteur $S_{eau,air}$ sont estimées à partir des relations fournies dans le protocole n°398 de l'IAEA (2000).

Pour le faisceau de photons de 12 MV, la face d'entrée de la cuve a été positionnée à 90 cm de la source et un champ d'irradiation de $10\times10\text{ cm}^2$ a été défini à 100 cm de la source. Les rendements en profondeur et profils de dose (à la profondeur de référence de 10 cm) ont été mesurés à l'aide de la même CI de type PTW-31002.

Tous les rendements en profondeur ont été normalisés au maximum de dose sur l'axe du faisceau. Les profils de dose, quant à eux, ont été normalisés par rapport à la dose sur l'axe.

Etant donné que toutes les mesures sont relatives, l'incertitude due au coefficient d'étalonnage de la CI de référence « disparaît ». Les incertitudes associées aux mesures sont alors de l'ordre de 0,4 % (1σ) pour le faisceau de photons et de 0,6 % (1σ) pour le faisceau d'électrons.

4.3. Mode électron 18 MeV

4.3.1. Spectre en énergie des électrons primaires

Pour le faisceau d'électrons de 18 MeV, la seule information fournie par le constructeur est l'énergie moyenne de 18 MeV. Dans ses travaux sur la simulation de ce faisceau, Blazy (2007) a choisi une distribution initiale gaussienne d'énergie moyenne de 18 MeV et d'écart-type de 1 MeV.

Dans cette étude, 21 rendements en profondeur ont été simulés avec le code MC PENELOPE en considérant des sources d'électrons primaires ponctuelles monoénergétiques d'énergie allant de 13 à 23 MeV par pas de 500 keV, autour de l'énergie annoncée par le constructeur. Ces rendements en profondeur calculés forment la matrice (E) théorique (dans l'équation 1). La représentation du spectre en énergie du faisceau initial a été ainsi déterminée en ajustant, par les moindres carrés avec la contrainte de non-négativité, les rendements en profondeur calculés à celui mesuré.

La Figure 3 illustre les différents rendements en profondeur calculés et celui mesuré. La représentation du spectre en énergie des électrons primaires, obtenue pour le faisceau d'électrons de 18 MeV, est illustrée sur la Figure 4.

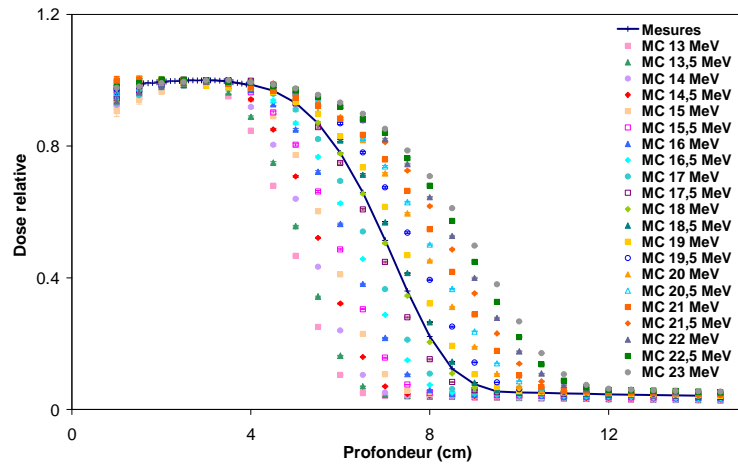


Figure 3 : Rendements en profondeur mesuré et calculés pour plusieurs faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques (électron 18 MeV, champ 10×10 cm²).

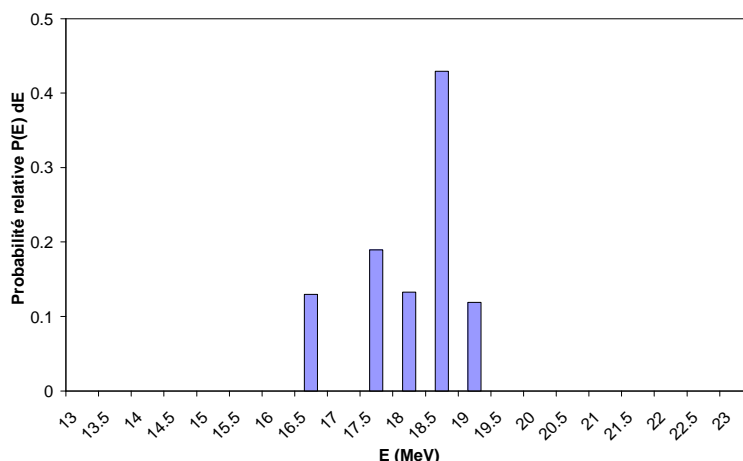


Figure 4 : Représentation discrète du spectre en énergie des électrons primaires (Saturne 43, électron 18 MeV). La largeur de l'histogramme ne représente pas une variation en énergie ; il s'agit d'une représentation graphique.

L'énergie moyenne du spectre représenté sur la Figure 4 est de 18 MeV. Cette valeur est compatible avec les données du constructeur et avec l'énergie moyenne de la distribution gaussienne choisie par Blazy (2007).

Cette représentation du spectre initial en énergie a été validée en comparant, à l'aide de l'index gamma, les distributions de dose calculées à celles mesurées dans l'eau. Les résultats sont présentés dans le Paragraphe 4.3.3.

4.3.2. Spectre en énergie à l'entrée du fantôme

La Figure 5 présente les spectres en énergie des différents types de particules (photons, électrons et positons) obtenus à l'entrée du fantôme positionnée à 100 cm de la source. Ces spectres sont relatifs au faisceau d'électrons de 18 MeV, de champ d'irradiation 10×10 cm², en considérant le spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment. Sur cette figure, l'axe des ordonnées correspond à la fluence dont l'unité correspond au nombre de particules/eV \times Nombre d'électrons primaires. L'axe des abscisses correspondant à l'énergie en MeV est subdivisé en canaux d'énergie de 100 keV.

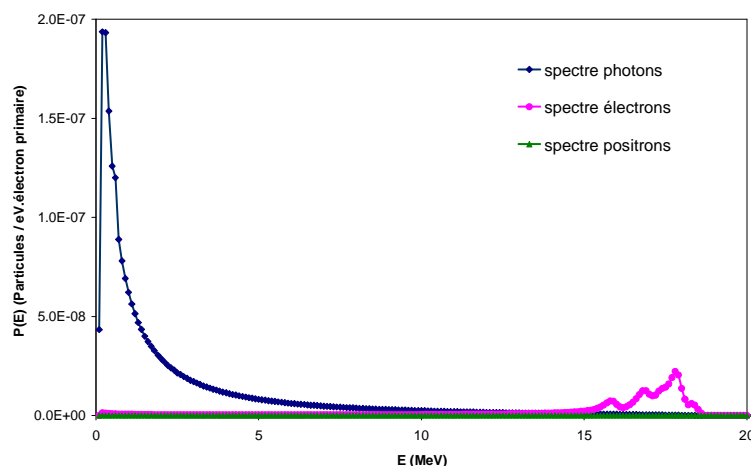


Figure 5 : Spectre en énergie des photons, électrons et positons à 100 cm de la source (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

L'énergie moyenne du faisceau d'électrons sortant de la tête d'irradiation est de 15,3 MeV. Cette valeur est très proche de celle trouvée par Blazy (2007), à savoir 15,1 MeV.

L'analyse de la Figure 5 met en évidence les constatations suivantes :

- Le spectre en énergie du faisceau composite (photons, électrons et positons) à 100 cm de la source diffère de celui des électrons primaires présenté sur la Figure 4. En effet, les interactions du faisceau d'électrons avec les différents composants de la tête d'irradiation (paire de diffuseurs, chambre moniteur et systèmes de collimation) modifient son énergie et donnent naissance à des photons de basse énergie qui viennent contaminer le faisceau d'électrons.
- La composante positon du spectre est négligeable par rapport à celles des photons et électrons.
- Le nombre de photons atteignant le plan à 100 cm de la source est 6 fois plus grand que celui des électrons alors qu'il s'agit d'un traitement par faisceau d'électrons !

Pour comprendre cette dernière constatation, la contribution des différents types de particules à la dose absorbée sur l'axe dans une cuve à eau placée à 100 cm de la source a été calculée par PENELOPE. Les résultats sont illustrés sur la Figure 6. Ils montrent que :

- Les photons (ayant un pouvoir de pénétration élevé) contribuent majoritairement à la dose absorbée à grande profondeur dans la queue du rendement en profondeur. C'est pour cette raison que cette partie du rendement est appelée composante de photons ou queue de rayonnement de freinage.

- La dose sur l'axe, jusqu'à 9 cm de profondeur, est majoritairement déposée par les électrons (ayant un pouvoir de pénétration plus faible que les photons).
- La contribution des positons à la dose absorbée est négligeable vu leur nombre négligeable dans le spectre (Figure 5).

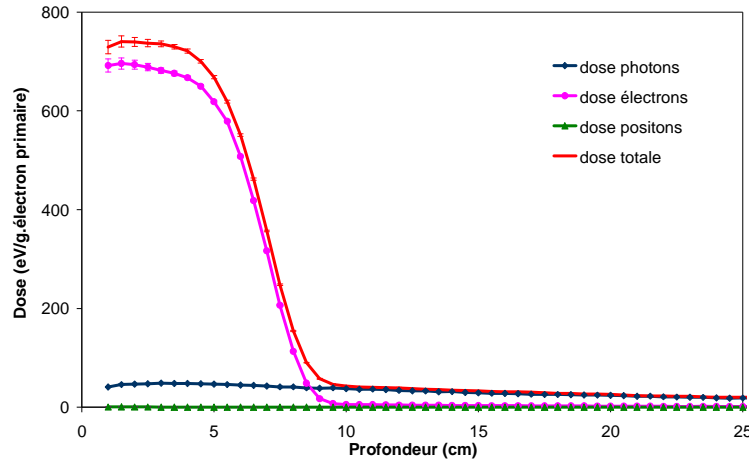


Figure 6 : Contributions des différents types de particules à la dose absorbée sur l'axe (électron 18 MeV, champ 10×10 cm²).

4.3.3. Distributions de dose

Le PSF du faisceau d'électrons de 18 MeV du Saturne 43, calculé en partant du spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment, a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec le code MC PENELOPE dans la cuve à eau. Les rendements en profondeur et les profils de dose (à 4,2 cm de profondeur) ainsi obtenus ont été comparés aux mesures expérimentales.

Le test de l'index gamma a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose calculées et mesurées. Pour mettre en œuvre cette méthode, un programme écrit sous MATLAB, a été développé pour calculer l'index gamma en une dimension. Les valeurs des critères d'acceptabilité ΔD_{max} et DTA ont été respectivement choisies égales à 1 % et 1 mm. Il est à noter que la valeur du critère d'acceptabilité sur la dose (ΔD_{max}) est compatible avec les incertitudes associées aux mesures qui sont largement inférieures à 1 % (1σ).

La Figure 7 présente la comparaison entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 8.

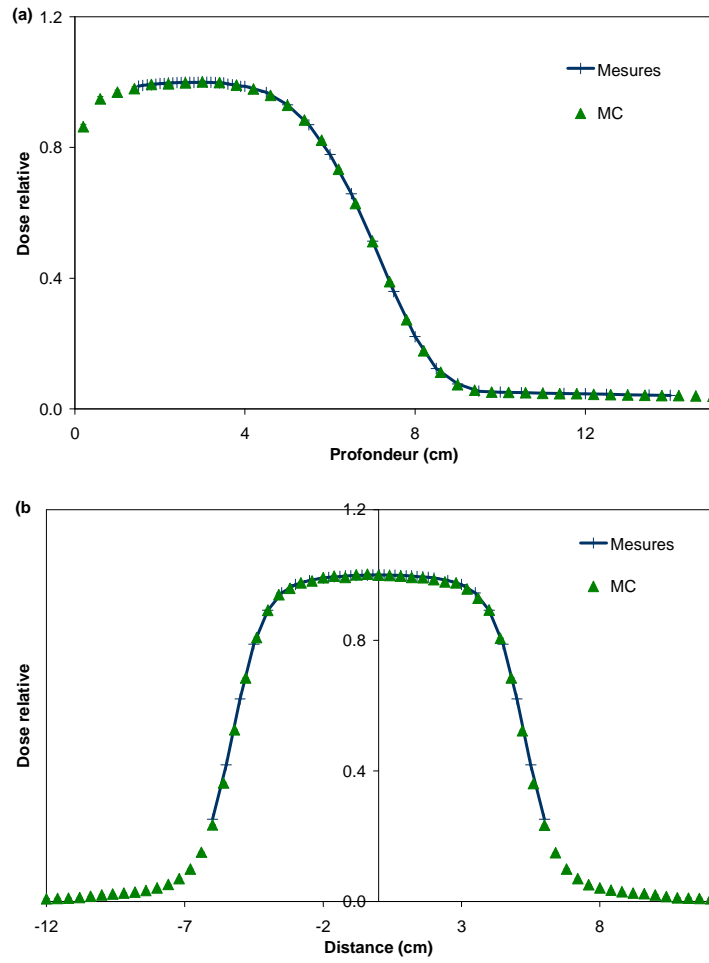


Figure 7 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Les résultats du test de l'index gamma mettent en évidence un bon accord entre les distributions de dose (rendements en profondeur et profils de dose) mesurées et calculées. Les écarts sont largement inférieurs à 1 % et 1 mm.

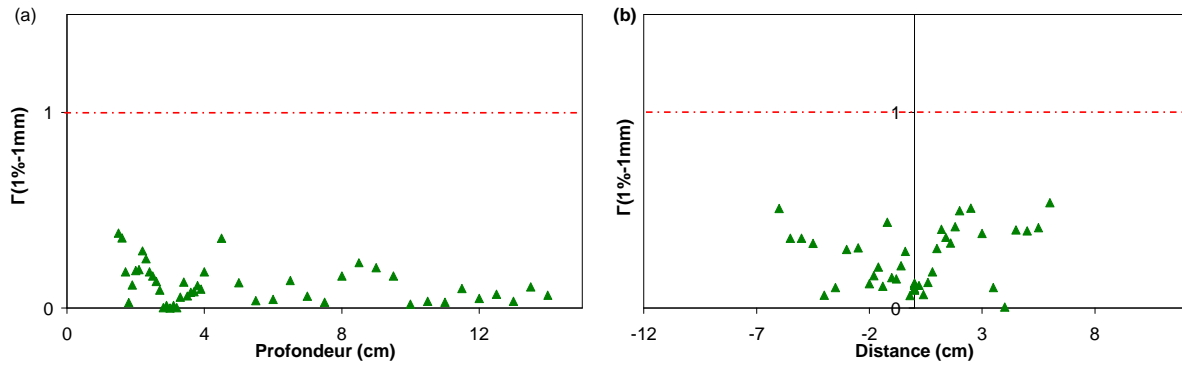


Figure 8 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

L'indice généralement utilisé pour évaluer la qualité d'un faisceau d'électrons est la profondeur R_{50} pour laquelle la dose absorbée est égale à 50 % de sa valeur maximale. Et cela, pour une distance source-surface de la cuve à eau constante de 100 cm et un champ d'irradiation d'au moins $10 \times 10 \text{ cm}^2$ si l'énergie moyenne du faisceau est inférieure ou égale à 16 MeV et d'au moins $20 \times 20 \text{ cm}^2$ si l'énergie moyenne du faisceau est supérieure ou égale à 16 MeV (IAEA 2000). Etant donné que nous ne disposons pas de mesures pour un champ d'irradiation de $20 \times 20 \text{ cm}^2$, la qualité du faisceau d'électrons de 18 MeV a été évaluée en estimant la profondeur P_{50} à laquelle se trouve 50 % de la dose maximale pour un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

La valeur de la portée pratique R_p a été aussi évaluée. Elle correspond à la profondeur à laquelle la composante photon de la dose devient équivalente à sa composante électron (IAEA 2000). En pratique, R_p représente la profondeur à laquelle se croisent la tangente à la pente de la dose primaire et la tangente à la queue du rendement due au rayonnement de freinage.

Le Tableau 2 regroupe les valeurs des indices P_{50} et R_p pour les mesures et les simulations effectuées avec le code MC PENELOPE. Toutes ces valeurs des indices P_{50} et R_p sont en bon accord.

Tableau 2 : Valeurs des indices P_{50} et R_p pour la mesure et la simulation (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

18 MeV	P_{50} (cm)	R_p (cm)
Mesures	7,04	8,61
MC	7,03	8,60

Les résultats présentés dans les Figures 7 et 8 et dans le Tableau 2 valident la modélisation géométrique ainsi que la caractérisation du faisceau initial par la méthode mise au point dans cette étude. Le PSF calculé contient 13 millions de particules et servira dans le prochain chapitre au calcul des distributions de dose dans les fantômes hétérogènes en vue de la validation du code MC PENFAST.

4.3.4. Comparaison aux résultats d'une distribution en énergie gaussienne

Les distributions de dose (rendement en profondeur et profil de dose), calculées précédemment à partir du spectre initial en énergie déterminé par la méthode des moindres carrés, ont été comparées à celles obtenues à partir d'une distribution énergétique gaussienne des électrons primaires identique à celle choisie par Blazy (2007) pour le faisceau d'électrons

de 18 MeV, à savoir une distribution gaussienne d'énergie moyenne de 18 MeV et un écart-type de 1 MeV.

Le test de l'index gamma (avec les critères d'acceptabilité 1 % et 1 mm) a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose calculées et mesurées.

La Figure 9 montre la comparaison entre les distributions de dose (rendements en profondeur et profils de dose) mesurées et calculées avec le code MC PENELOPE. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 10.

L'analyse de ces résultats démontre que les distributions de dose obtenues à partir des deux spectres initiaux sont globalement équivalentes ; le rendement en profondeur obtenu avec le spectre ajusté par la méthode des moindres carrés étant meilleur dans la zone proche du parcours pratique (Figure 10a).

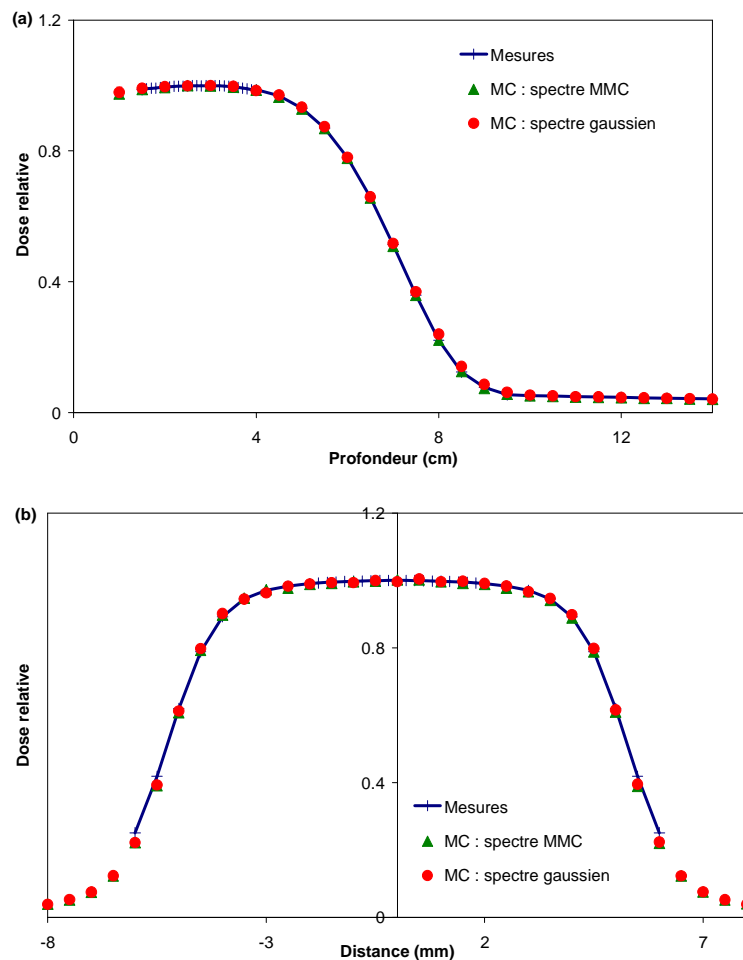


Figure 9 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés à partir d'un spectre en énergie ajusté par la méthode des moindres carrés (MMC) et à partir d'un spectre énergétique gaussien (électron 18 MeV, champ 10×10 cm²).

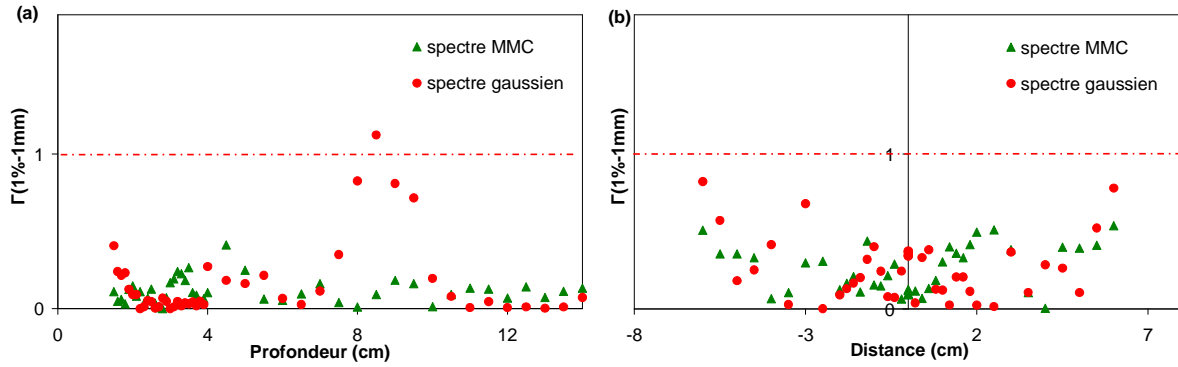


Figure 10 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) calculés à partir d'un spectre en énergie ajusté par la méthode des moindres carrés (MMC) et à partir d'un spectre énergétique gaussien (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

4.4. Mode photon 12 MV

4.4.1. Spectre en énergie des électrons primaires

Pour le faisceau de photons de 12 MV, le constructeur annonce une énergie moyenne de 12 MeV. Dans les travaux de Mazurier *et al.* (1999), il a été mis en évidence que l'énergie moyenne des électrons initiaux à l'origine de ce faisceau de photons était très proche de l'énergie de 12 MeV annoncée par le constructeur. Plus récemment, Blazy (2007) a choisi une distribution énergétique gaussienne des électrons primaires, d'énergie moyenne de 12 MeV et d'écart-type de 450 keV.

Dans notre étude, huit rendements en profondeur ont été simulés avec le code MC PENELOPE en considérant des sources d'électrons primaires ponctuelles monoénergétiques d'énergie allant de 8 à 15 MeV, autour de l'énergie annoncée par le constructeur. Étant donné que les rendements en profondeur issus d'un faisceau de photons sont moins sensibles à l'énergie que ceux issus d'un faisceau d'électrons, un pas d'énergie de 1 MeV a été considéré pour la caractérisation du faisceau de photons de 12 MV. La représentation du spectre en énergie du faisceau initial a été déterminée en ajustant, par la méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité, les rendements en profondeur calculés à celui mesuré.

La Figure 11 illustre les différents rendements en profondeur calculés et celui mesuré. La représentation du spectre en énergie des électrons primaires, obtenue pour le faisceau de photons de 12 MV est illustrée sur la Figure 12.

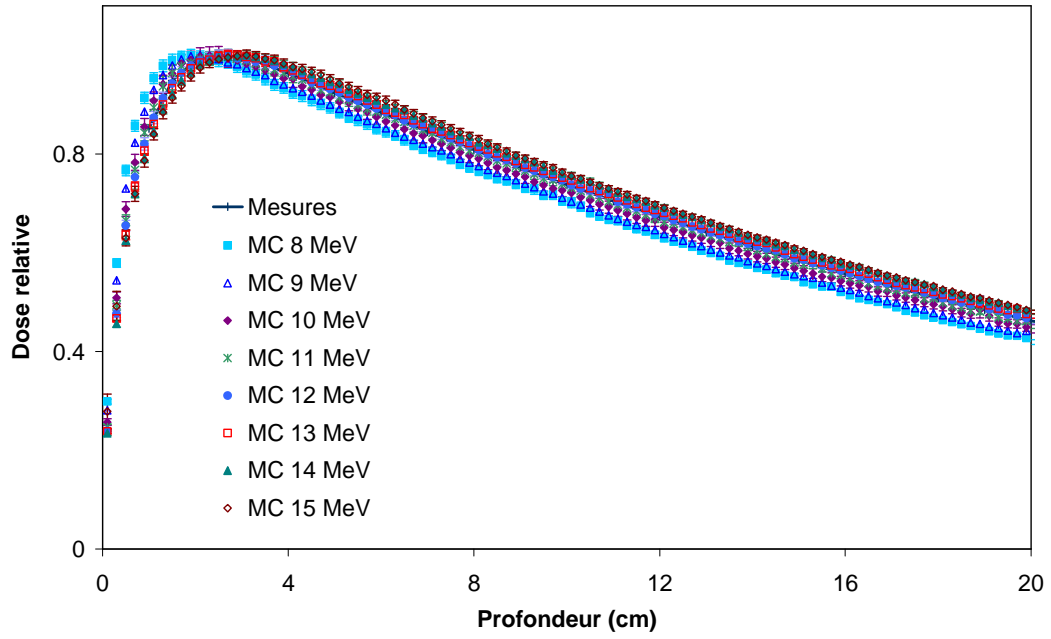


Figure 11 : Rendements en profondeur mesuré et calculés pour plusieurs faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques (photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

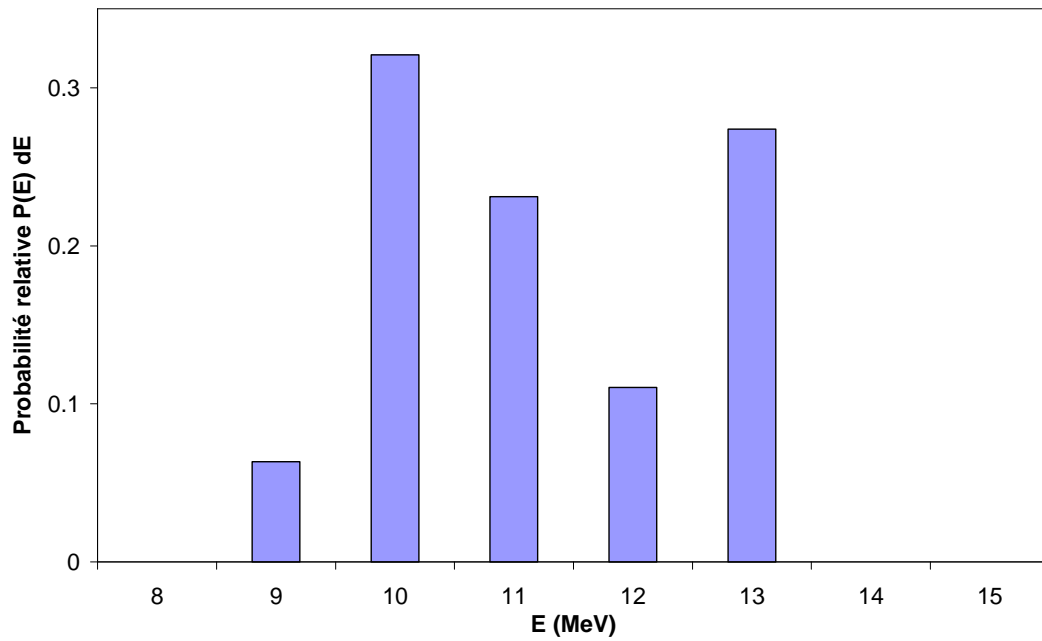


Figure 12 : Représentation discrète du spectre en énergie des électrons primaires (Saturne 43, photon 12 MV).

4.4.2. Spectre en énergie à l'entrée du fantôme

La Figure 13 présente les spectres en énergie des différents types de particules (photons, électrons et positons¹) obtenus à l'entrée du fantôme positionnée à 90 cm de la source. Ces spectres sont relatifs au faisceau de photons de 12 MV, de champ d'irradiation 10×10 cm², en considérant le spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment.

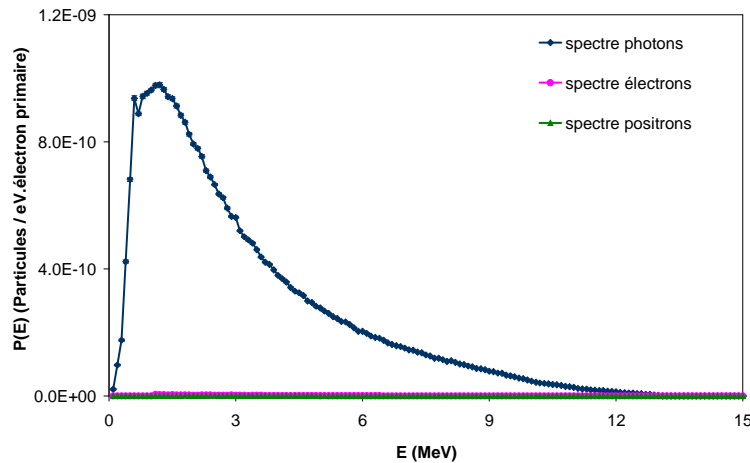


Figure 13 : Spectre en énergie des photons, électrons et positons à 90 cm de la source (photon 12 MV, champ 10×10 cm²).

L'examen de cette figure met en évidence que les composantes électron et positon dans le spectre sont négligeables par rapport à la composante photon. Il s'agit d'un spectre continu de rayons X dont l'énergie s'étale jusqu'à l'énergie maximale des électrons primaires. Le pic observé à 511 keV est dû à l'annihilation des positons issus de la création de paires. L'énergie moyenne du faisceau de sortie est de 3,23 MeV. Cette valeur est compatible avec celle trouvée par Blazy (2007), à savoir 3,24 MeV.

4.4.3. Distributions de dose

Le PSF calculé pour le faisceau de photons de 12 MV, en partant du spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment, a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec le code MC PENELOPE dans la cuve à eau. Les rendements

¹ A haute énergie, le faisceau contient aussi des neutrons qui ne sont pas simulés par le code PENELOPE.

en profondeur et profils de dose (à 10 cm de profondeur) ainsi obtenus ont été comparés aux mesures expérimentales.

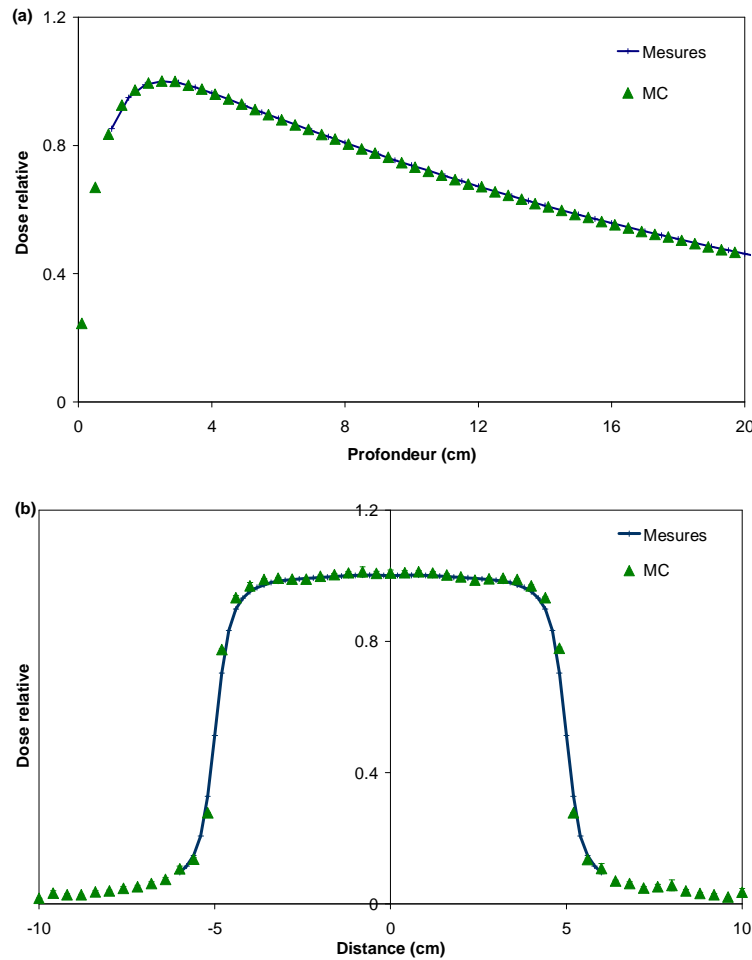


Figure 14 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Comme pour le faisceau d'électrons de 18 MeV, le test de l'index gamma (avec les critères d'acceptabilité 1 % et 1 mm) a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose calculées et mesurées.

La Figure 14 montre la comparaison entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 15. Les résultats du test de l'index gamma mettent en évidence un bon accord entre les distributions de dose (rendements en profondeur et profils de dose) mesurées et calculées. Les écarts sont inférieurs à 1 % et 1 mm.

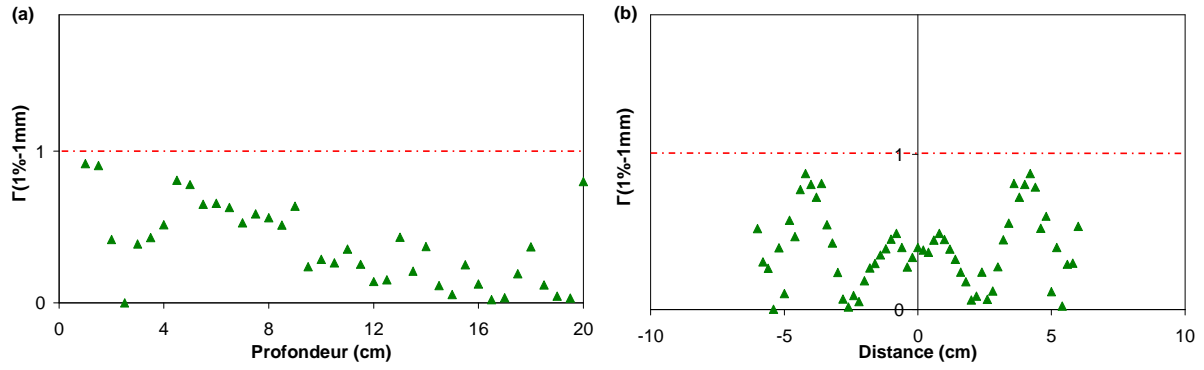


Figure 15 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) (photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Pour évaluer la qualité d'un faisceau de photons, l'indice utilisé est le $TPR_{20,10}$ (*Tissue Phantom Ratio 20/10* utilisé en Europe, IAEA 2000) ou le $PDD_{20,10}$ (*Percent Depth Doses 20/10* utilisé aux Etats-Unis, Almond *et al.* 1999). Le $TPR_{20,10}$ correspond au rapport des doses absorbées à 20 cm et 10 cm de profondeur, sur l'axe du faisceau, pour une distance source-détecteur constante de 100 cm (déplacement de la cuve à eau) et un champ d'irradiation de $10 \times 10 \text{ cm}^2$. Le $PDD_{20,10}$ correspond au rapport des doses absorbées à 20 cm et 10 cm de profondeur, sur l'axe du faisceau, pour une distance source-surface de la cuve à eau constante de 100 cm (déplacement du détecteur) et un champ d'irradiation de $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

Etant donné que nous ne disposions ni de mesures à une distance source-détecteur constante, ni de mesures à une distance source-surface du fantôme de 100 cm, la qualité du faisceau de photons de 12 MV a été évaluée en estimant le rapport D_{20} / D_{10} entre les doses à 20 cm et à 10 cm de profondeur, sur l'axe du faisceau, pour une distance source-surface du fantôme de 90 cm et un champ d'irradiation de $10 \times 10 \text{ cm}^2$. Le Tableau 3 regroupe les valeurs des rapports D_{20} / D_{10} pour la mesure et la simulation avec le code MC PENELOPE. Les deux valeurs sont en accord.

Tableau 3 : Valeurs des rapports D_{20} / D_{10} pour la mesure et la simulation (photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

12 MV	D_{20} / D_{10}
Mesures	0,628
MC	0,626

Les résultats présentés dans les Figures 14 et 15 et dans le Tableau 3 valident la modélisation géométrique ainsi que la caractérisation du faisceau initial. Le PSF calculé contient 500

millions de particules et servira dans le prochain chapitre au calcul des distributions de dose dans les fantômes hétérogènes en vue de la validation du code MC PENFAST.

4.5. Conclusion

L'application de la méthode d'ajustement du spectre énergétique initial, mise au point dans cette étude, à la caractérisation des faisceaux issus de l'accélérateur Saturne 43 a mis en évidence les points suivants :

- La validation de cette méthode grâce au bon accord obtenu entre les distributions de dose mesurées et calculées. Il est important de préciser qu'en mode électron cette méthode permet d'obtenir une représentation discrète du spectre réel. En mode photon, le spectre en énergie obtenu est moins réel à cause de la faible sensibilité des rendements en profondeur à la variation de l'énergie des électrons primaires.
- La robustesse, la simplicité de mise en œuvre et la rapidité de cette méthode par rapport aux méthodes empiriques souvent utilisées qui déterminent par tâtonnement plusieurs paramètres initiaux permettant de rapprocher les résultats calculés à ceux mesurés expérimentalement. En effet, cette nouvelle méthode ne distingue qu'un seul degré de liberté qui prend en compte l'énergie moyenne, la distribution en énergie (incluant l'asymétrie du spectre) et la fenêtre en énergie des électrons primaires.

5. Application aux faisceaux issus de l'accélérateur linéaire Primus de Siemens

Dans le cadre des tests effectués sur la méthode du calcul de dose par MC dans le TPS ISOgray™, les faisceaux de l'accélérateur Primus fabriqué par le constructeur Siemens ont été utilisés. Les géométries de la tête d'irradiation opérant en mode photon 25 MV et en mode électron 9 MeV ont été modélisées avec le code MC PENELOPE pour le champ de référence (10×10 cm²), des petits champs (4×4 cm² en mode photon et 6×6 cm² en mode électron) et un grand champ (20×20 cm²) définis à 100 cm de la source. Les différents éléments de la tête d'irradiation ont été modélisés suivant les informations fournies par le constructeur. Les détails de la modélisation géométrique de la tête d'irradiation pour les deux modes étudiés sont fournis dans l'Annexe D.

Comme pour l'accélérateur Saturne 43, la simulation de la tête de l'accélérateur a pour origine la source d'électrons primaires au niveau d'une fenêtre de sortie en titane de la section déviatrice. Les caractéristiques de cette source sont à déterminer.

5.1. Paramètres de simulation

Les valeurs des paramètres de simulation PENELOPE pour le faisceau de photons (25 MV) ainsi que pour le faisceau d'électrons (9 MeV) sont résumées dans le Tableau 4. Pour les simulations dans la cuve à eau, le choix des énergies de coupure pour les électrons et les positons est compatible avec l'épaisseur du volume de détection ($4 \times 4 \times 4 \text{ mm}^3$ en mode photon et $4 \times 4 \times 2 \text{ mm}^3$ en mode électron), la portée d'un électron de 100 keV étant de 0,15 mm dans l'eau.

Tableau 4 : Paramètres de simulation PENELOPE des faisceaux de photons de 25 MV et d'électrons de 9 MeV.

Paramètres	25 MV	9 MeV
C1 = C2	0,05	0,05
Wcc (keV) = Wcr (keV)	10	10
Energies de coupure (keV)		
tête d'irradiation (e-, photons, e+)	500, 10, 500	300, 10, 300
cuve à eau (e-, photons, e+)	100, 10, 100	100, 10, 100
Nombre d'électrons primaires	$1,5 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^7$
Techniques de réduction de variance		
tête d'irradiation	BNUM*, RR*, SPLIT*, SPLITC*	-
cuve à eau	NSPLIT = 25	-

*BNUM : « Splitting » du rayonnement de freinage, RR : Roulette Russe, SPLIT : « Splitting » angulaire et SPLITC : « Splitting » circulaire. Les valeurs retenues pour ces techniques sont précisées dans le Chapitre II, Paragraphe 3.3.

La taille des voxels choisie ($4 \times 4 \times 4 \text{ mm}^3$ en mode photon et $4 \times 4 \times 2 \text{ mm}^3$ en mode électron) est un bon compromis entre l'exactitude de la dose calculée et l'incertitude associée à cette dose. En effet, le volume de détection ne doit pas être trop petit, sinon, le nombre d'histoires nécessaires pour obtenir une incertitude correcte doit être plus élevé, ce qui entraîne un temps de simulation plus long. A l'opposé, le volume des voxels ne doit pas être trop grand afin de limiter l'effet de l'intégration d'un gradient de dose.

L'incertitude statistique maximale (1σ) associée aux calculs MC avec PENELOPE dans les régions de forte dose (entre 50 % et 100 % de la dose maximale) et dans les régions de faible dose (inférieure à 50 % de la dose maximale) est illustrée dans le Tableau 5 pour les deux modes et les différents champs étudiés.

Tableau 5 : Incertitude statistique maximale (1σ) associée aux calculs MC pour les deux modes et les différents champs étudiés.

Faisceau	Incertitude statistique maximale (1σ)	
Photons 25 MV	Région de forte dose	Région de faible dose
Champ 4×4 cm ²	3 %	4 %
Champ 10×10 cm ²	1,5 %	2 %
Champ 20×20 cm ²	1,5 %	2 %
Electrons 9 MeV		
Champ 6×6 cm ²	2,7 %	4 %
Champ 10×10 cm ²	0,5 %	3 %
Champ 20×20 cm ²	0,5 %	3 %

5.2. Mesures expérimentales

Les rendements en profondeur et les profils de dose ont été mesurés à l'aide d'une CI, de type « Scanditronix Wellhöfer CC13 Compact Chamber » (volume sensible de 0,13 cm³), dans une cuve à eau de 50×50×50 cm³.

En mode électron, la surface de la cuve a été placée à 100 cm de la source. Les faisceaux définissant des champs 6×6, 10×10 et 20×20 cm² ont été étudiés. Les profils de dose ont été mesurés à 2 cm de profondeur (profondeur de référence). Les distributions de dose mesurées ont été corrigées du facteur $S_{eau,air}$ (IAEA 2000).

En mode photon, la surface de la cuve a été positionnée à 90 cm de la source. Les champs étudiés sont les 4×4, 10×10 et 20×20 cm² définis à 100 cm de la source. Les profils de dose ont été mesurés aux profondeurs 4 cm (profondeur du maximum de dose) et 10 cm (profondeur de référence).

Toutes les distributions de dose ont été normalisées au maximum de dose. Les incertitudes associées aux mesures sont de l'ordre de 1,5 %² (1σ).

² Il s'agit d'une estimation globale des incertitudes type A et B.

5.3. Mode électron 9 MeV

5.3.1. Spectre en énergie des électrons primaires

Pour le mode électron 9 MeV, le constructeur annonce une distribution énergétique gaussienne d'énergie moyenne de 9,4 MeV et de fenêtre en énergie de 14 % par rapport à l'énergie moyenne.

Comme pour l'accélérateur Saturne, nous avons utilisé la méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité associée aux simulations MC (PENELOPE) pour déterminer une représentation du spectre en énergie des électrons primaires de l'accélérateur Primus opérant en mode électron 9 MeV. Dans cette étude, 21 rendements en profondeur ont été simulés avec le code MC PENELOPE en considérant des sources d'électrons primaires ponctuelles monoénergétiques d'énergie allant de 7 à 11 MeV par pas de 200 keV, autour de l'énergie moyenne annoncée par le constructeur. Le pas en énergie a été choisi en fonction de la sensibilité des rendements en profondeur à la variation de l'énergie (en effet, un changement de l'énergie initiale de 200 keV correspond à un changement de 1 mm du parcours pratique du faisceau d'électrons). La représentation du spectre en énergie du faisceau initial a été déterminée en ajustant, par la méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité, les rendements en profondeur calculés à celui mesuré. Les simulations ont été réalisées pour le champ de référence $10 \times 10 \text{ cm}^2$ défini à 100 cm de la source.

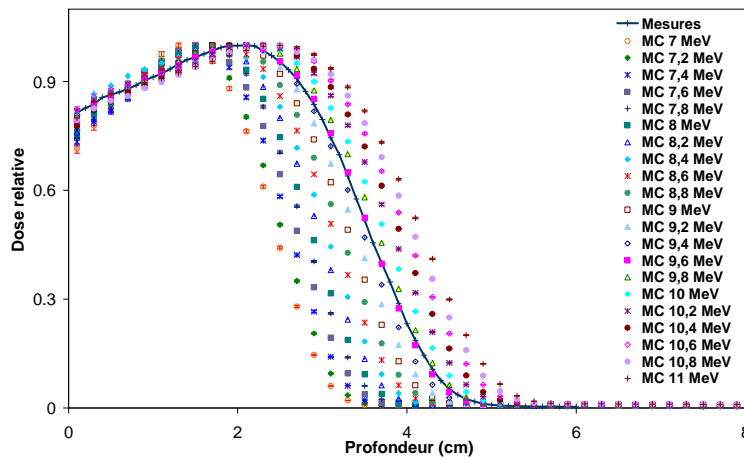


Figure 16 : Rendements en profondeur mesuré et calculés pour plusieurs faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques (électron 9 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

La Figure 16 illustre les différents rendements en profondeur calculés et celui mesuré. La représentation du spectre en énergie des électrons primaires, obtenue pour le faisceau d'électrons de 9 MeV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, est illustrée sur la Figure 17.

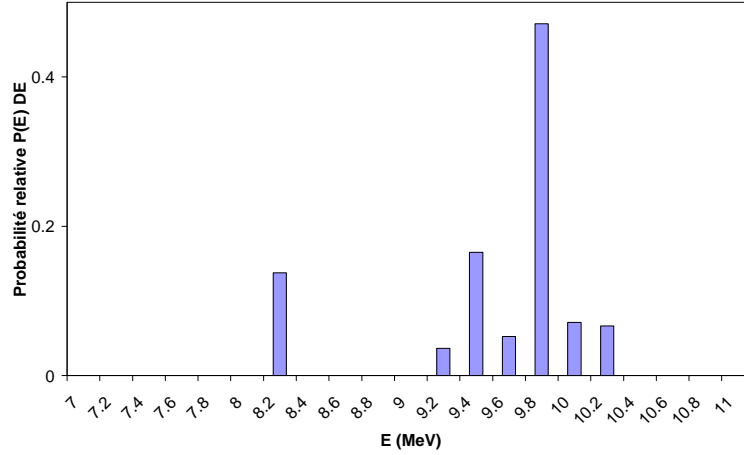


Figure 17 : Représentation discrète du spectre en énergie des électrons primaires (Primus, électron 9 MeV).

L'énergie moyenne du spectre représenté dans cette figure est de 9,4 MeV. Cette valeur est compatible avec la valeur de l'énergie moyenne de la distribution gaussienne annoncée par le constructeur et choisie par Franchisseur (2007).

5.3.2. Spectre en énergie à l'entrée du fantôme

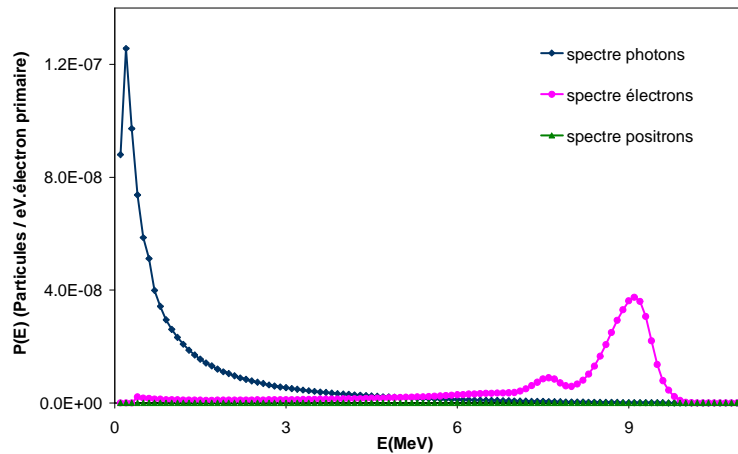


Figure 18 : Spectre en énergie des photons, électrons et positons à 100 cm de la source (électron 9 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

La Figure 18 présente les spectres en énergie des différents types de particules obtenus à l'entrée du fantôme positionnée à 100 cm de la source. Ces spectres sont relatifs au faisceau

d'électrons de 9 MeV, de champ d'irradiation $10 \times 10 \text{ cm}^2$, en considérant le spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment.

Comme cela a été déjà constaté pour le faisceau d'électrons de 18 MeV de l'accélérateur Saturne 43, les interactions du faisceau d'électrons avec les différents composants de la tête du Primus modifient son énergie et donnent naissance à des photons de basse énergie. Ces photons déposent leur énergie dans la queue du rendement en profondeur due au rayonnement de freinage. La composante positon du spectre est quant à elle négligeable par rapport à celles des photons et électrons.

5.3.3. Distributions de dose

5.3.3.1. Faisceau d'électrons de 9 MeV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$

Le PSF calculé pour le faisceau d'électrons de 9 MeV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, en partant du spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment, a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec le code MC PENELOPE dans la cuve à eau. Les rendements en profondeur et profils de dose (à 2 cm de profondeur) ainsi obtenus ont été comparés aux mesures expérimentales.

Comme pour l'accélérateur Saturne 43, le test de l'index gamma a été utilisé pour comparer les distributions de dose mesurées et calculées. Les valeurs des critères d'acceptabilité ΔD_{max} et DTA retenues pour valider les simulations MC des faisceaux du Primus sont choisies égales à 2 % et 1 mm. Ces valeurs sont compatibles avec les incertitudes associées aux mesures en conditions cliniques d'irradiation (de l'ordre de 1,5 % à 1σ).

La Figure 19 présente la comparaison entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 20.

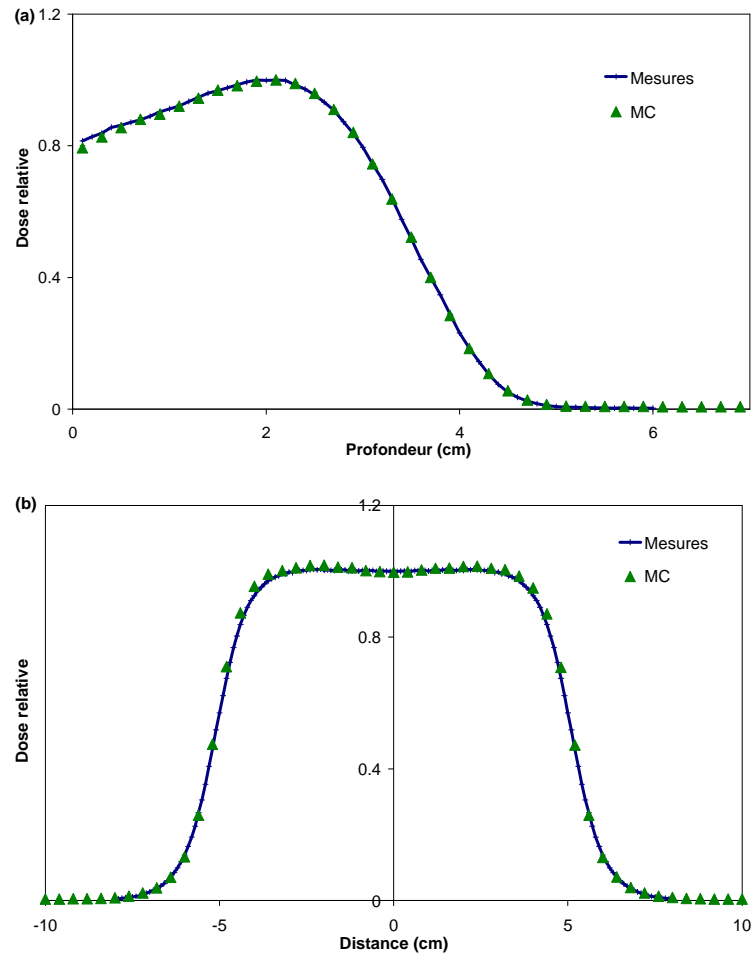


Figure 19 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (électron 9 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

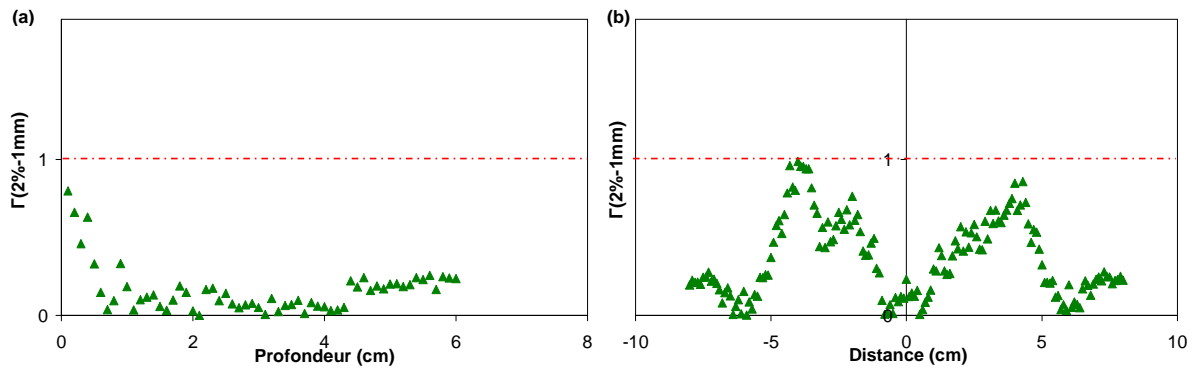


Figure 20 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) (électron 9 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Les résultats du test de l'index gamma mettent en évidence un bon accord entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les écarts sont inférieurs à 2 % et 1 mm.

5.3.3.2. Validation de la méthode pour les petits et grands champs

La même distribution énergétique des électrons primaires, déterminée précédemment pour le champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, a servi pour la simulation des petits et grands champs. Les faisceaux d'électrons de 9 MeV définissant un champ d'irradiation de $6 \times 6 \text{ cm}^2$ et de $20 \times 20 \text{ cm}^2$ à 100 cm de la source ont été simulés avec le code MC PENELOPE.

La Figure 21 présente la comparaison des rendements en profondeur et des profils de dose (à 2 cm de profondeur) mesurés et simulés pour le faisceau d'électrons de 9 MeV, de champ $6 \times 6 \text{ cm}^2$. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 22. Les mêmes comparaisons sont présentées sur les Figures 23 et 24 pour le grand champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$.

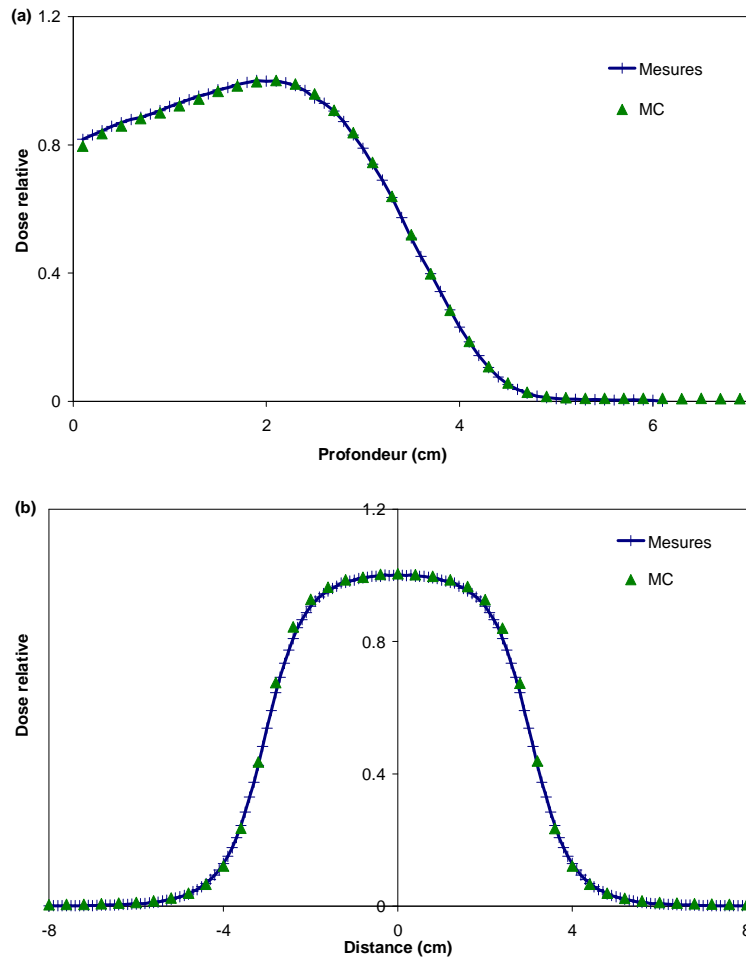


Figure 21 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (électron 9 MeV, champ $6 \times 6 \text{ cm}^2$).

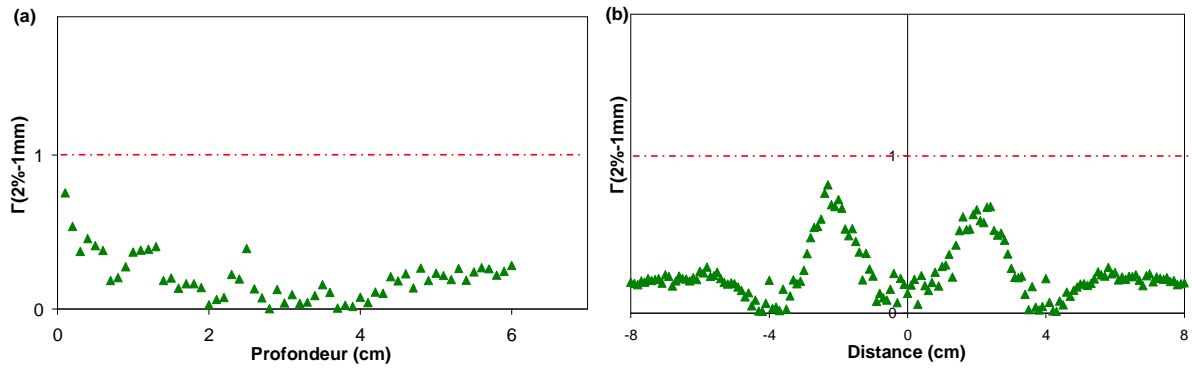


Figure 22 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) (électron 9 MeV, champ $6 \times 6 \text{ cm}^2$).

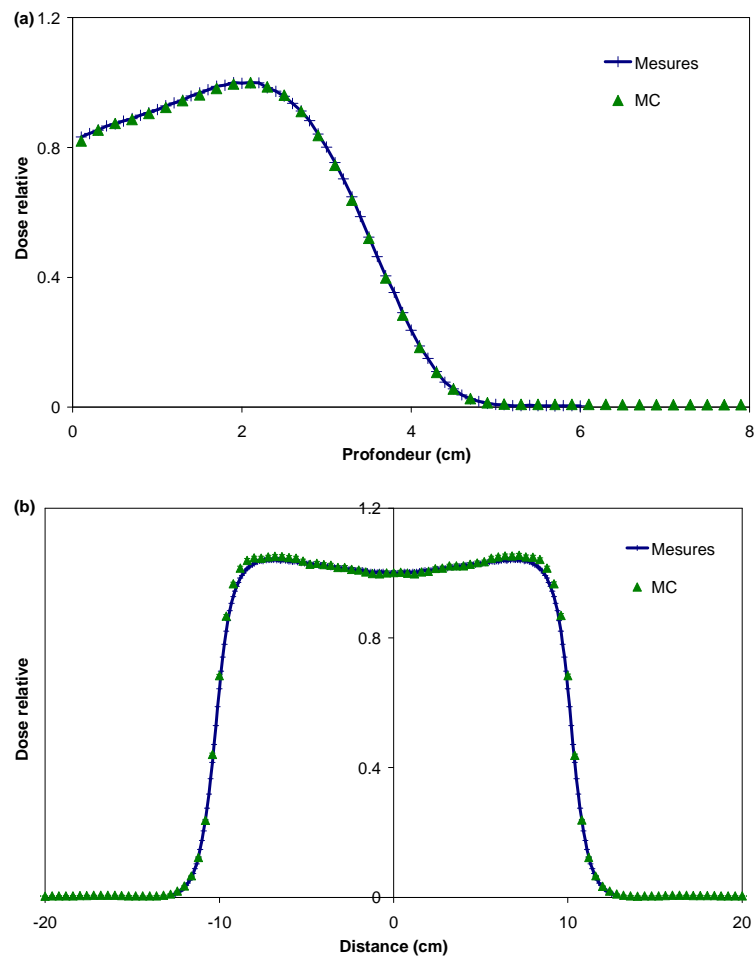


Figure 23 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (électron 9 MeV, champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$).

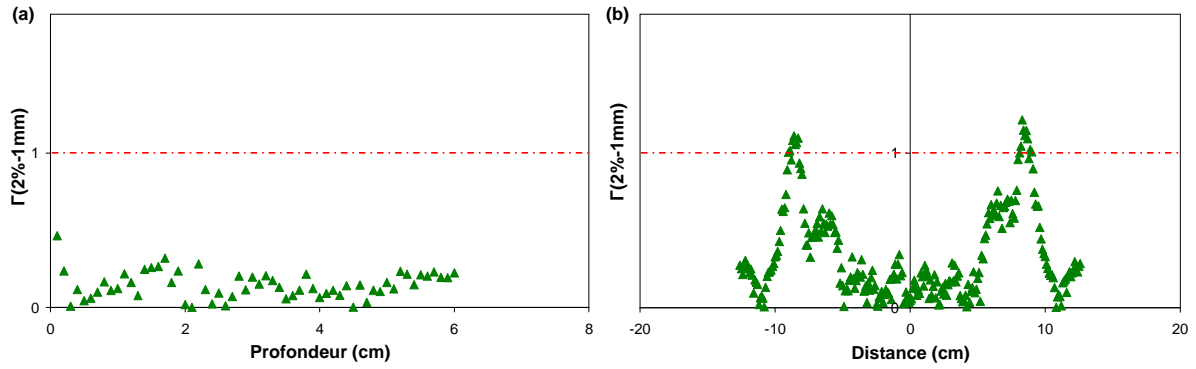


Figure 24 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) (électron 9 MeV, champ 20×20 cm²).

Les résultats du test de l'index gamma montrent un bon accord entre les rendements en profondeur et les profils de dose mesurés et calculés pour le petit et le grand champs. Les écarts sont inférieurs à 2 % et 1 mm. Il est important de préciser que dans le cas du grand faisceau, le résultat du test de l'index gamma est rejeté dans la zone des épaulements du profil de dose (à une distance latérale de 8,5 cm de part et d'autre de l'axe du faisceau, Figure 24b). A ces distances présentant un fort gradient de dose, l'écart entre la mesure et la simulation ne dépasse pas tout de même 1,5 mm.

La profondeur R_{50} pour laquelle la dose absorbée est égale à 50 % de sa valeur maximale a été évaluée pour le champ d'irradiation de 10×10 cm² défini à 100 cm de la source (IAEA 2000). En outre, les valeurs des parcours pratiques R_p ont été déterminées pour les mesures et les simulations PENELOPE pour les trois tailles de champs du mode électron 9 MeV. Les valeurs de ces indices sont regroupées dans le Tableau 6. Les valeurs simulées sont en accord avec celles mesurées.

Tableau 6 : Valeurs des indices R_{50} et R_p pour les mesures et les simulations pour les trois tailles de champs du mode électron 9 MeV.

Champ (cm ²)	R_{50} (cm)		R_p (cm)	
	Mesures	MC	Mesures	MC
6×6	-	-	4,41	4,41
10×10	3,53	3,54	4,41	4,40
20×20	-	-	4,39	4,38

Les résultats présentés dans les Figures 19-24 et dans le Tableau 6 valident la modélisation géométrique ainsi que la caractérisation du faisceau initial pour les trois tailles de champs du mode électron 9 MeV. Les PSF calculés pour les champs 6×6, 10×10 et 20×20 cm² contiennent respectivement 24, 30 et 69 millions de particules. Ils serviront, dans le Chapitre V, au calcul des distributions de dose dans les fantômes hétérogènes en vue de la validation du TPS-MC.

5.4. Mode photon 25 MV

5.4.1. Spectre en énergie des électrons primaires

Pour le mode photon 25 MV, le constructeur fournit, à partir de l'intensité de la bobine magnétique (Bending Magnet Intensity ou BMI), une énergie moyenne des électrons primaires de 19,06 MeV, une énergie maximale de 20,25 MeV et une énergie minimale de 17,87 MeV. Des travaux antérieurs sur la simulation de ce faisceau ont présenté une distribution énergétique gaussienne d'énergie moyenne de 15 MeV (simulation avec le code MCNPX, Serrano 2006) ou de 16,5 MeV (simulation avec la version 2003 du code PENELOPE, Franchisseur 2007) et d'une fenêtre en énergie de 14 % par rapport à l'énergie moyenne³.

Dans notre étude, neuf rendements en profondeur ont été simulés avec le code MC PENELOPE en considérant des sources d'électrons primaires ponctuelles monoénergétiques d'énergie allant de 13,5 à 21,5 MeV par pas de 1 MeV, autour de l'énergie moyenne annoncée par le constructeur. La représentation du spectre en énergie du faisceau initial a été déterminée en ajustant, par la méthode des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité, les rendements en profondeur calculés à celui mesuré. Les simulations ont été réalisées pour le champ de référence 10×10 cm² défini à 90 cm de la source.

La Figure 25 illustre les différents rendements en profondeur calculés et celui mesuré. La représentation du spectre en énergie des électrons primaires, obtenue pour le faisceau de photons de 25 MV, de champ 10×10 cm², est représentée sur la Figure 26.

³ Il est important de noter que les distributions de dose expérimentales utilisées dans notre étude pour optimiser les paramètres initiaux ne sont pas identiques à celles utilisées par Serrano (2006) et Franchisseur (2007).

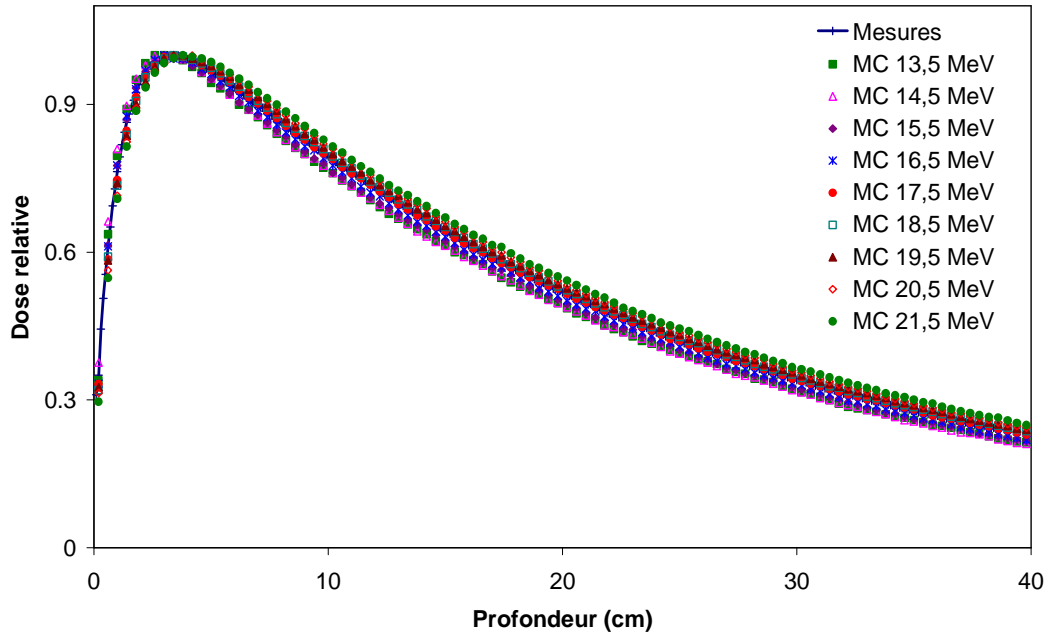


Figure 25 : Rendements en profondeur mesuré et calculés pour plusieurs faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques (photon 25 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

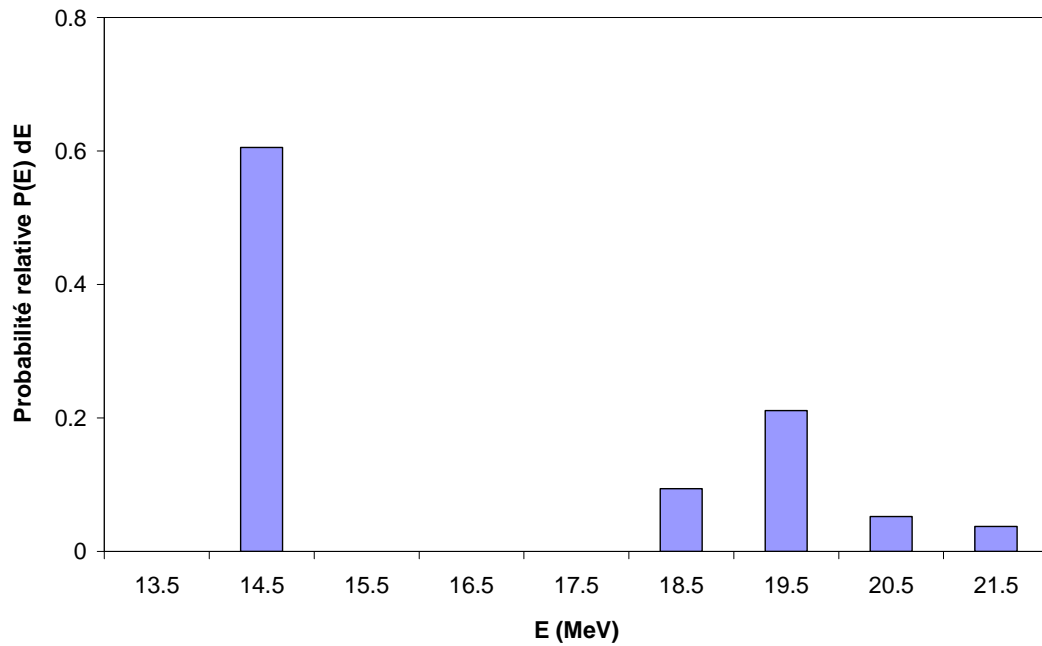


Figure 26 : Représentation discrète du spectre en énergie des électrons primaires (Primus, photon 25 MV).

5.4.2. Spectre en énergie à l'entrée du fantôme

La Figure 27 présente les spectres en énergie des différents types de particules obtenus à l'entrée du fantôme positionnée à 90 cm de la source. Ces spectres sont relatifs au faisceau de

photons de 25 MV, de champ d'irradiation $10 \times 10 \text{ cm}^2$, en considérant le spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment.

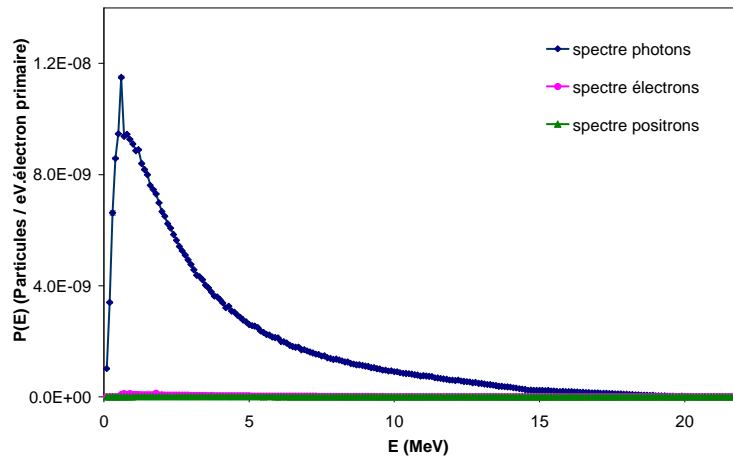


Figure 27 : Spectre en énergie des photons, électrons et positons à 90 cm de la source (photon 25 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

L'examen de la Figure 27 montre que le spectre à l'entrée du fantôme est majoritairement composé de photons (les contributions électron et positon dans le spectre sont négligeables). Le pic observé à 511 keV est dû à l'annihilation des positons issus de la création de paires.

5.4.3. Distributions de dose

5.4.3.1. Faisceau de photons de 25 MV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$

Le PSF calculé pour le faisceau de photons de 25 MV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, en partant du spectre en énergie des électrons primaires déterminé précédemment, a servi comme donnée d'entrée pour le calcul des distributions de dose avec le code MC PENELOPE dans la cuve à eau. Les rendements en profondeur et profils de dose (à 4 et 10 cm de profondeur) ainsi obtenus ont été comparés aux mesures expérimentales.

Comme pour le faisceau d'électrons de 9 MeV, le test de l'index gamma a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose mesurées et calculées. La Figure 28 illustre la comparaison entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 29.

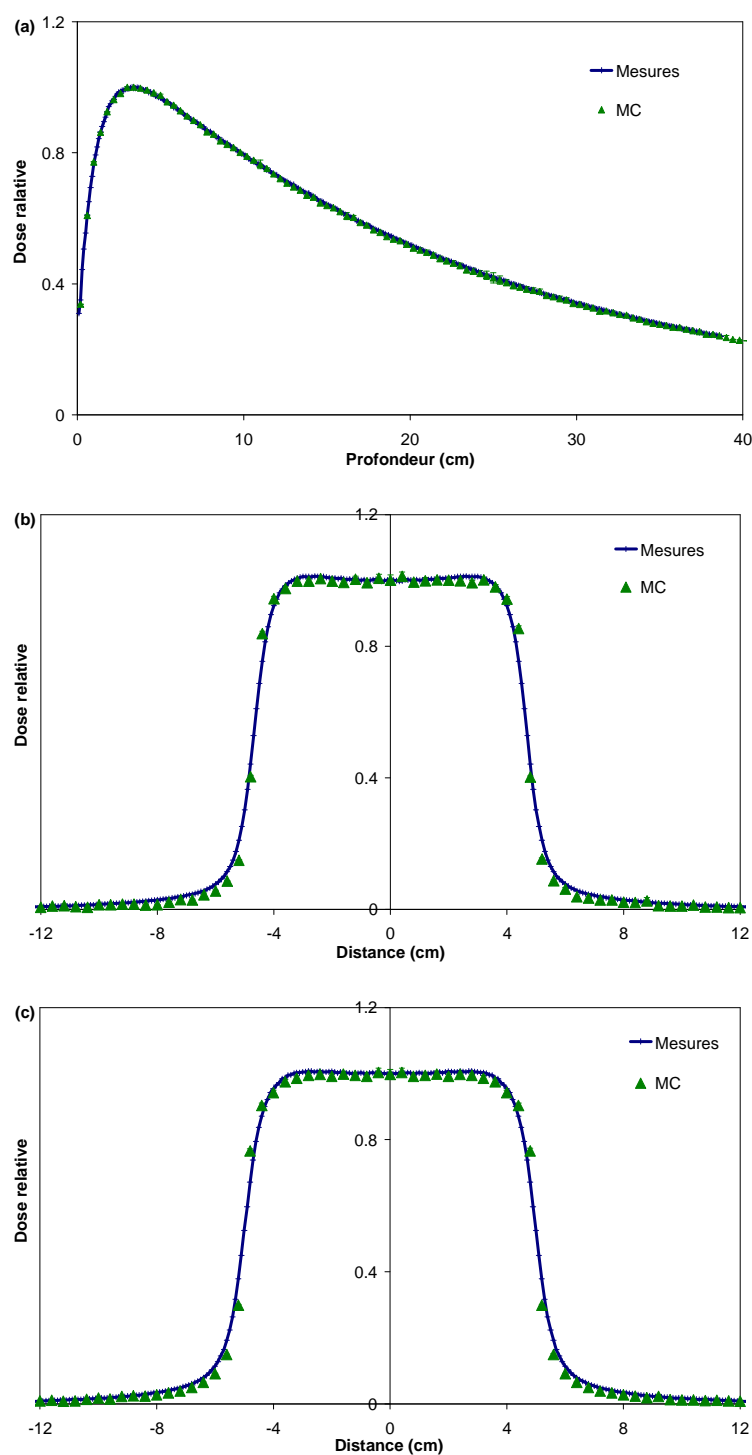


Figure 28 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm de profondeur (c) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (photon 25 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

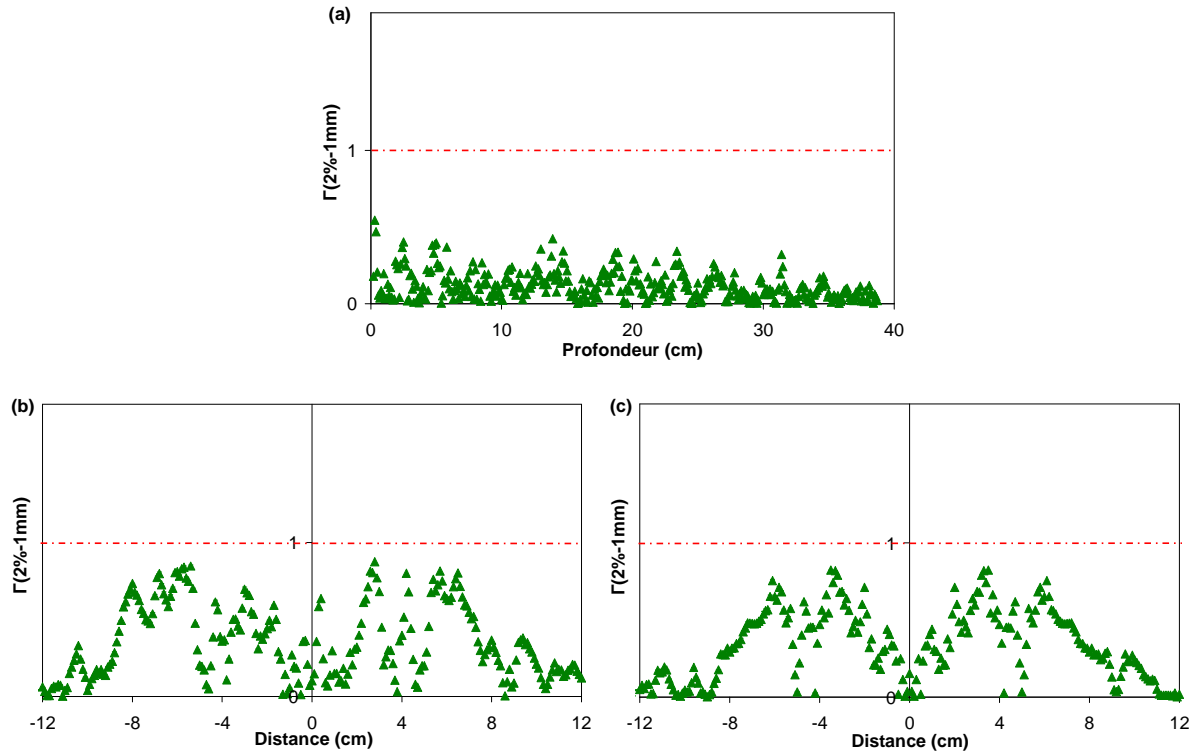


Figure 29 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm (c) de profondeur (photon 25 MV, champ 10×10 cm²).

Les résultats du test de l'index gamma montrent un bon accord entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les écarts sont inférieurs à 2 % et 1 mm.

5.4.3.2. Validation de la méthode pour les petits et grands champs

La même distribution énergétique des électrons primaires, déterminée précédemment pour le champ 10×10 cm², a servi pour la simulation des petits et grands champs. Les faisceaux de photons de 25 MV définissant un champ d'irradiation de 4×4 cm² et de 20×20 cm² à 90 cm de la source ont été simulés avec le code MC PENELOPE.

La Figure 30 illustre la comparaison des rendements en profondeur et des profils de dose (aux profondeurs 4 et 10 cm) mesurés et simulés pour le faisceau de photons de 25 MV, de champ 4×4 cm². Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 31. Les mêmes comparaisons sont présentées sur les Figures 32 et 33 pour le grand champ 20×20 cm².

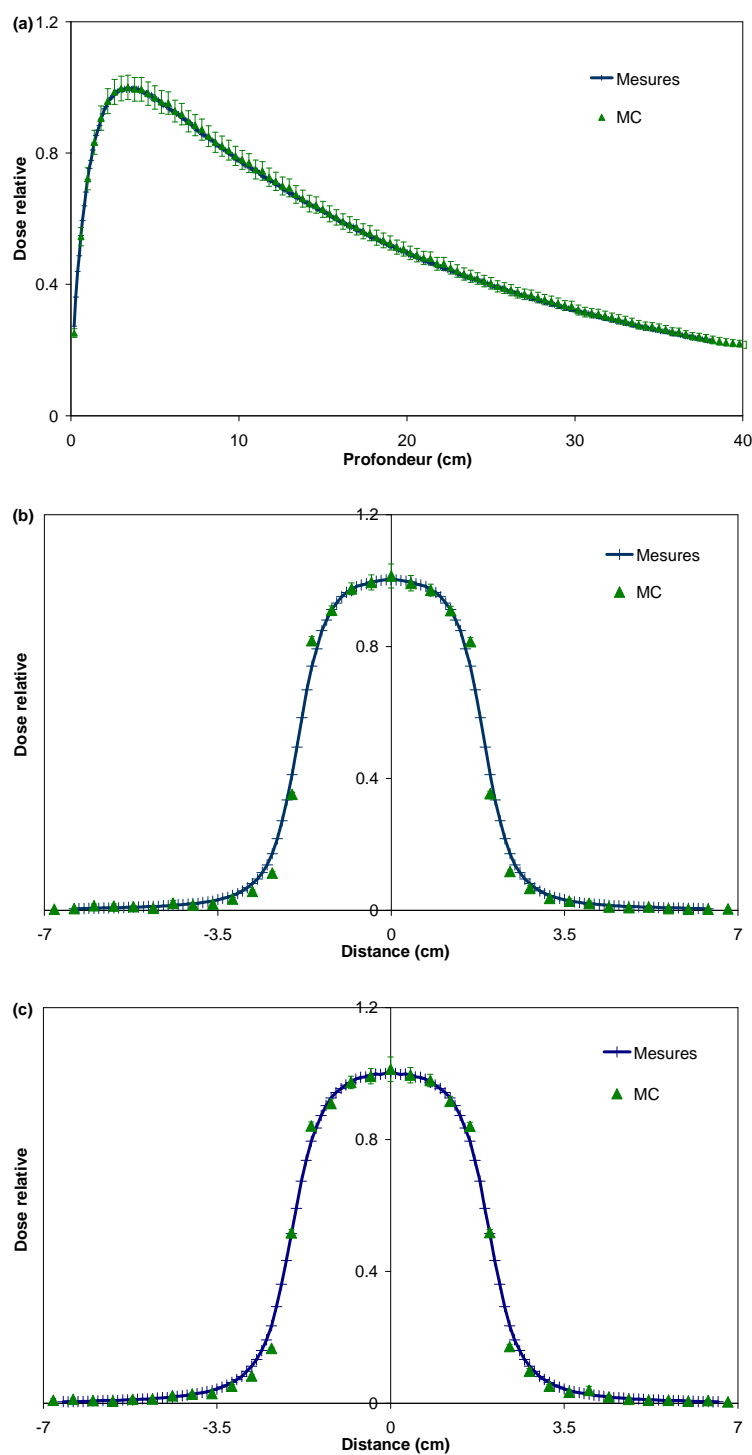


Figure 30 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm de profondeur (c) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (photon 25 MV, champ $4 \times 4 \text{ cm}^2$).

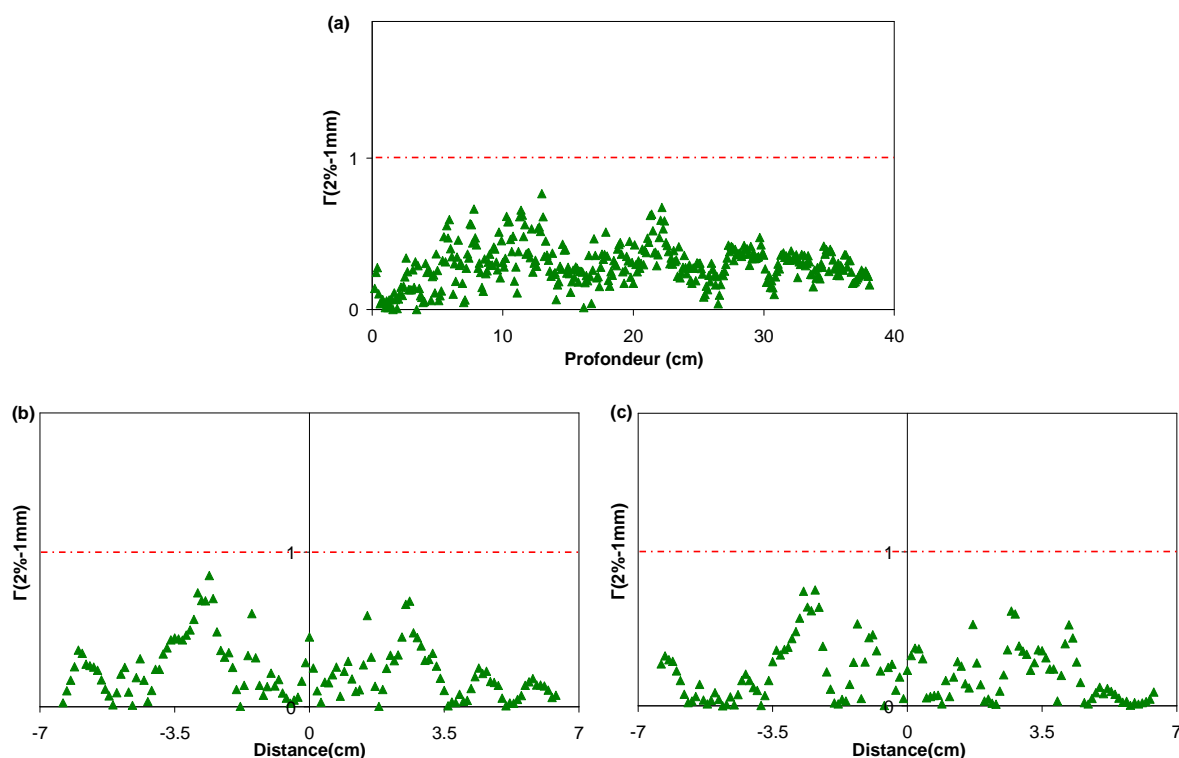


Figure 31 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm (c) de profondeur (photon 25 MV, champ $4 \times 4 \text{ cm}^2$).

Les résultats du test de l'index gamma mettent en évidence un bon accord entre les rendements en profondeur et les profils de dose mesurés et calculés pour le petit et le grand champs. Les écarts sont inférieurs à 2 % et 1 mm. Il est à noter que dans le cas du petit faisceau, la dose est moyennée sur le volume de la CI ou sur le volume de détection. Cela peut modifier la valeur de la dose dans les régions de forts gradients de dose (comme dans la pénombre, Figures 30b et c).

Le Tableau 7 regroupe les valeurs des rapports D_{20} / D_{10} entre les doses sur l'axe à 20 cm et à 10 cm de profondeur mesurés et simulés avec PENELOPE pour les trois tailles de champs du mode photon 25 MV. Les valeurs simulées sont en accord avec celles mesurées.

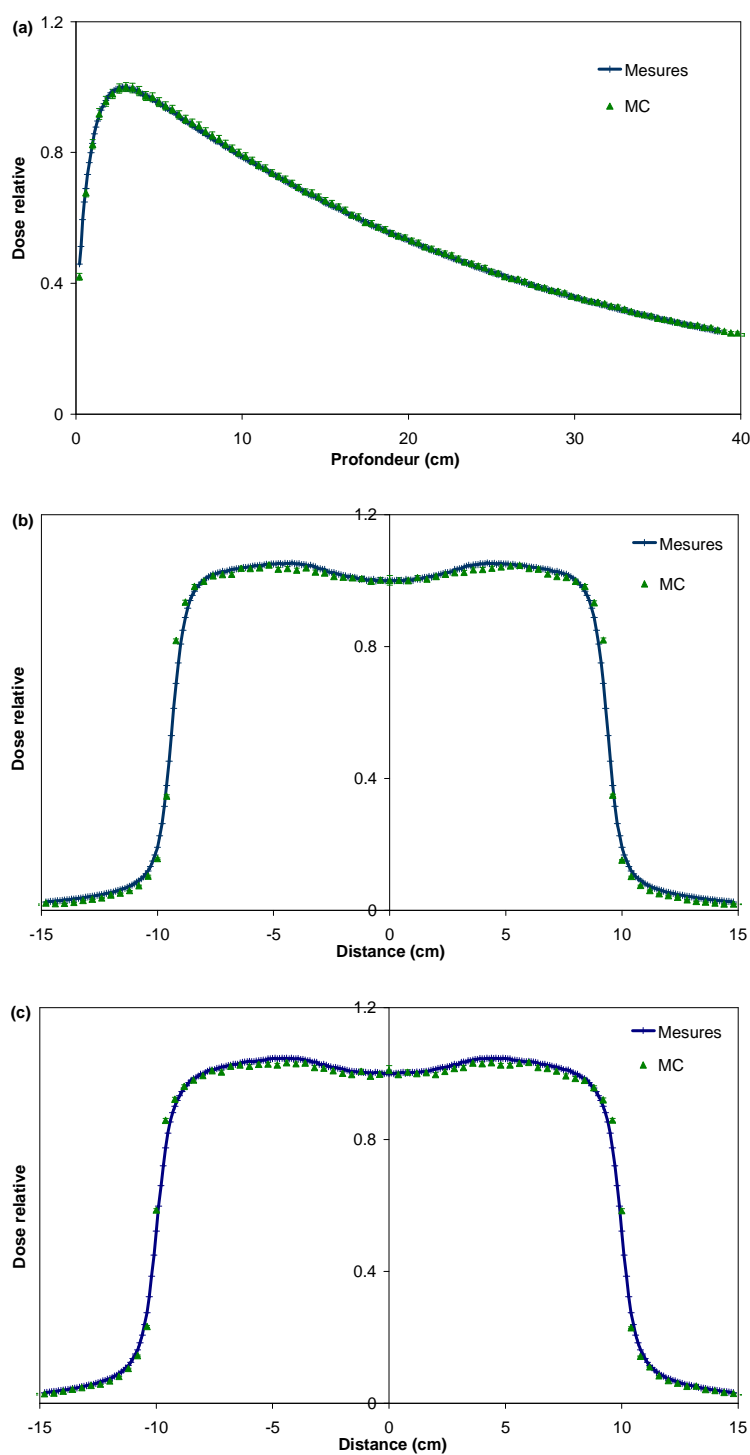


Figure 32 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm de profondeur (c) mesurés et calculés avec le code MC PENELOPE (photon 25 MV, champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$).

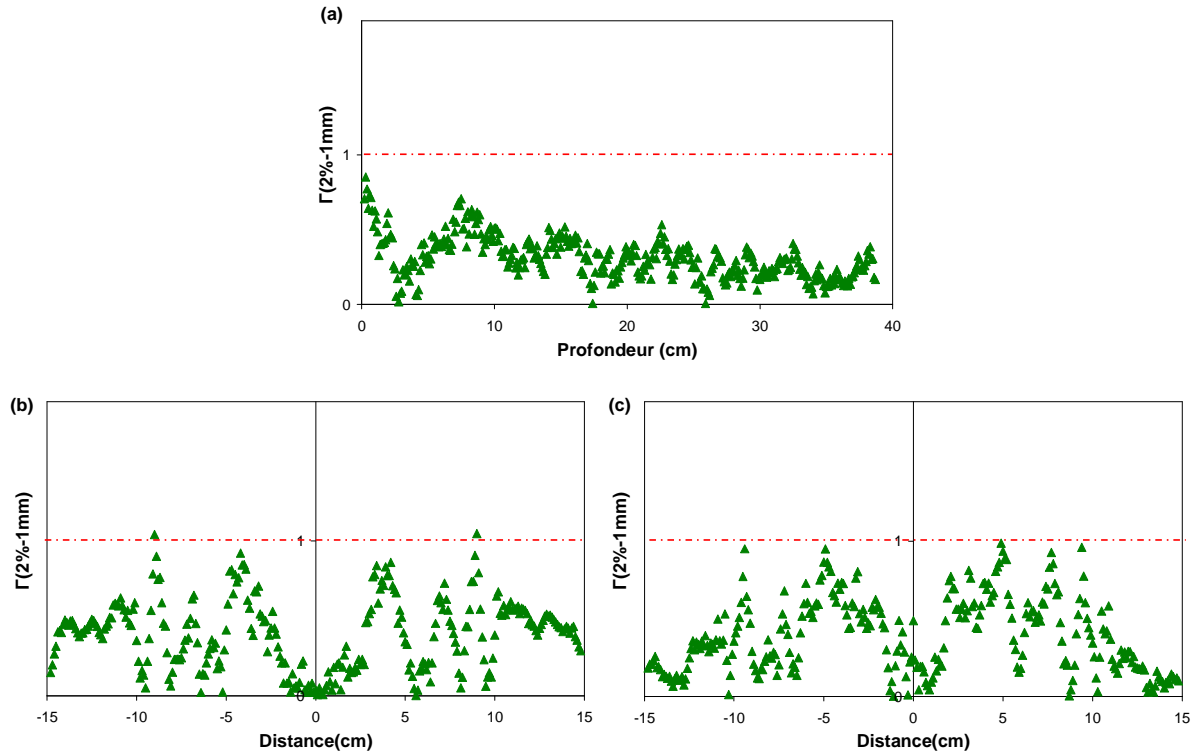


Figure 33 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose à 4 cm (b) et à 10 cm (c) de profondeur (photon 25 MV, champ 20×20 cm²).

Tableau 7 : Valeurs des rapports D_{20} / D_{10} pour les mesures et les simulations MC avec PENELOPE pour les trois tailles de champs du mode photon 25 MV.

Champ (cm ²)	Mesures	MC
4×4	0,640	0,642
10×10	0,652	0,650
20×20	0,673	0,672

Les résultats présentés dans les Figures 28-33 et dans le Tableau 7 valident la modélisation géométrique ainsi que la caractérisation du faisceau initial pour les trois tailles de champs du mode photon 25 MV. Les PSF calculés pour les champs 4×4, 10×10 et 20×20 cm² contiennent respectivement 10, 80 et 400 millions de particules. Ils serviront, dans le Chapitre V, au calcul des distributions de dose dans les fantômes hétérogènes en vue de la validation du TPS-MC.

5.5. Conclusion

En plus de la conclusion issue de l'étude sur l'accélérateur Saturne 43 (cf. Paragraphe 4.5), l'application de la méthode d'ajustement du spectre énergétique initial à la caractérisation des faisceaux issus de l'accélérateur Primus a validé cette méthode quelle que soit la taille du

champ. La représentation du spectre en énergie obtenue par ajustement des résultats pour le champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$ est valide pour les autres champs du mode de traitement impliqué.

Cette conclusion montre la robustesse de cette méthode par rapport aux méthodes empiriques qui, nécessitent parfois un changement de l'énergie ou de la géométrie de certains éléments de la tête d'irradiation (par exemple, la distance entre les diffuseurs primaire et secondaire) afin d'avoir des résultats équivalents aux mesures, en particulier pour les grands champs (Bieda *et al.* 2001, Schreiber et Faddegon 2005, Pena *et al.* 2007).

6. Conclusions

La difficulté de déterminer le spectre en énergie continu réel des électrons primaires nous a poussés à chercher une méthode déterminant une représentation spectrale mathématique qui induit un dépôt de dose correspondant à la réalité expérimentale.

Ce chapitre a donc présenté une nouvelle méthode de représentation du spectre en énergie des électrons primaires d'un accélérateur linéaire en ajustant, par le principe des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité, les rendements en profondeur calculés à partir de faisceaux initiaux monoénergétiques à celui mesuré. L'application de cette méthode à la caractérisation de divers faisceaux initiaux des deux accélérateurs Saturne 43 et Primus a mis en évidence les constatations suivantes :

Premièrement, la simplicité de mise en œuvre et la rapidité de cette méthode. Elle ne distingue en effet qu'un seul degré de liberté qui prend en compte l'énergie moyenne, la distribution en énergie (incluant l'asymétrie du spectre) et la fenêtre en énergie des électrons primaires. Elle est plus rapide et systématique que celles souvent utilisées pour déterminer empiriquement chacun de ces trois paramètres caractérisant le spectre (trois degrés de liberté).

Deuxièmement, la validation de cette méthode pour la détermination d'une représentation du spectre énergétique des électrons primaires pour toutes les tailles de champs, en particulier pour le mode électron. Elle permet, en effet, de déterminer la « meilleure » représentation spectrale en énergie au sens des moindres carrés si la gamme d'énergie des rendements en profondeur simulés est choisie convenablement (c'est-à-dire, un nombre suffisant de faisceaux monoénergétiques simulés avec un pas en énergie suffisamment faible pour tenir compte de la sensibilité de la dose à l'énergie).

Les PSF créés à l'entrée des fantômes et validés, en milieu homogène à l'aide de l'index gamma, serviront comme source de rayonnement pour le calcul des distributions de dose au sein des fantômes hétérogènes dans les prochains chapitres.

Chapitre IV

VALIDATION DU CALCUL DE DOSE AVEC LE CODE MONTE CARLO PENFAST EN CONDITIONS METROLOGIQUES

1. Introduction

Aussi précis et évolué soit-il, tout code de calcul pour la planification du traitement des patients en radiothérapie doit être validé avant son utilisation clinique.

Le nouveau code de calcul de dose par MC PENFAST (Salvat *et al.* 2008a, 2008b, en prep.), est fondé sur les mêmes modèles physiques d'interaction utilisés dans le code MC généraliste PENELOPE (Salvat *et al.* 2006). Cependant, PENFAST utilise de nouveaux algorithmes de transport pour les électrons et les positons. Il est à rappeler que la précision sur la dose calculée avec PENFAST dépend essentiellement de trois éléments fondamentaux :

- Le modèle physique et les sections efficaces du code.
- Les données définissant la source de rayonnements (c'est-à-dire le PSF) qui dépend de la caractérisation du faisceau et de la modélisation géométrique de la tête d'irradiation.
- Les données de géométrie qui dépendent de la conversion des UH en matériau et masse volumique attribués à chaque voxel.

L'objectif de ce chapitre est de valider la physique du code PENFAST en évaluant l'influence des simplifications sur les distributions de dose calculées (Habib *et al.* 2009). La validation des PSF utilisés comme données d'entrée pour le calcul de dose a fait l'objet d'une étude précédente (cf. Chapitre III). La validation du code PENFAST a été réalisée sur des fantômes numériques définis en utilisant les caractéristiques physiques et géométriques exactes des matériaux. Les images TDM des fantômes n'ont pas été utilisées pour s'affranchir de l'erreur sur la conversion des UH en données de simulation et de ce fait, valider le modèle physique du code. La validation de cette conversion a fait l'objet d'une étude ultérieure qui sera présentée dans le prochain chapitre.

Etant donné que le modèle physique de PENFAST est une version optimisée de celui de PENELOPE, le premier peut être validé en comparant ses résultats avec ceux obtenus par PENELOPE dans des conditions identiques. En effet, jusqu'à maintenant, un grand nombre d'études ont déjà démontré la capacité du code PENELOPE à simuler, avec précision, le transport de photons et d'électrons dans la matière et au voisinage des interfaces entre les matériaux (Sempau *et al.* 2001, 2003 ; Carrasco *et al.* 2004, 2007 ; Blazy *et al.* 2006 ; Salvat *et al.* 2006 ; Blazy 2007 ; Franchisseur 2007).

Ce chapitre décrit la validation dosimétrique des simulations MC PENFAST en milieux homogène et hétérogènes (os, poumon). Cette validation a été réalisée, en conditions métrologiques, pour un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV issus de l'accélérateur linéaire Saturne 43 installé au LNHB. Les distributions de dose calculées avec PENFAST ont été comparées à celles calculées avec PENELOPE ainsi qu'à celles mesurées expérimentalement.

La première partie de ce chapitre décrit la configuration des fantômes utilisés dans cette étude ainsi que les conditions expérimentales de mesures et les paramètres de simulation MC. Les résultats des tests de la validation dosimétrique du code PENFAST ainsi que le gain en temps de calcul par rapport à PENELOPE sont présentés dans la dernière partie de ce chapitre. L'influence de la composition des matériaux sur la dose calculée est également argumentée dans cette partie.

2. Matériels et méthodes

2.1. Fantômes hétérogènes utilisés

Les fantômes hétérogènes utilisés pour la validation du calcul de dose avec le code MC PENFAST sont composés de matériaux équivalent-poumon (de Computerized Imaging Reference Systems Incorporated ou CIRS) de faible densité et équivalent-os (CIRS) de haute densité. Les hétérogénéités de formes parallélépipédiques sont immergées dans une cuve à eau de dimensions $40 \times 40 \times 40 \text{ cm}^3$. La paroi en plexiglas (polyméthacrylate de méthyle ou PMMA) de la cuve a une épaisseur de 1,5 cm sauf à la fenêtre d'entrée du faisceau de $12 \times 12 \text{ cm}^2$ où son épaisseur mesure 0,4 cm.

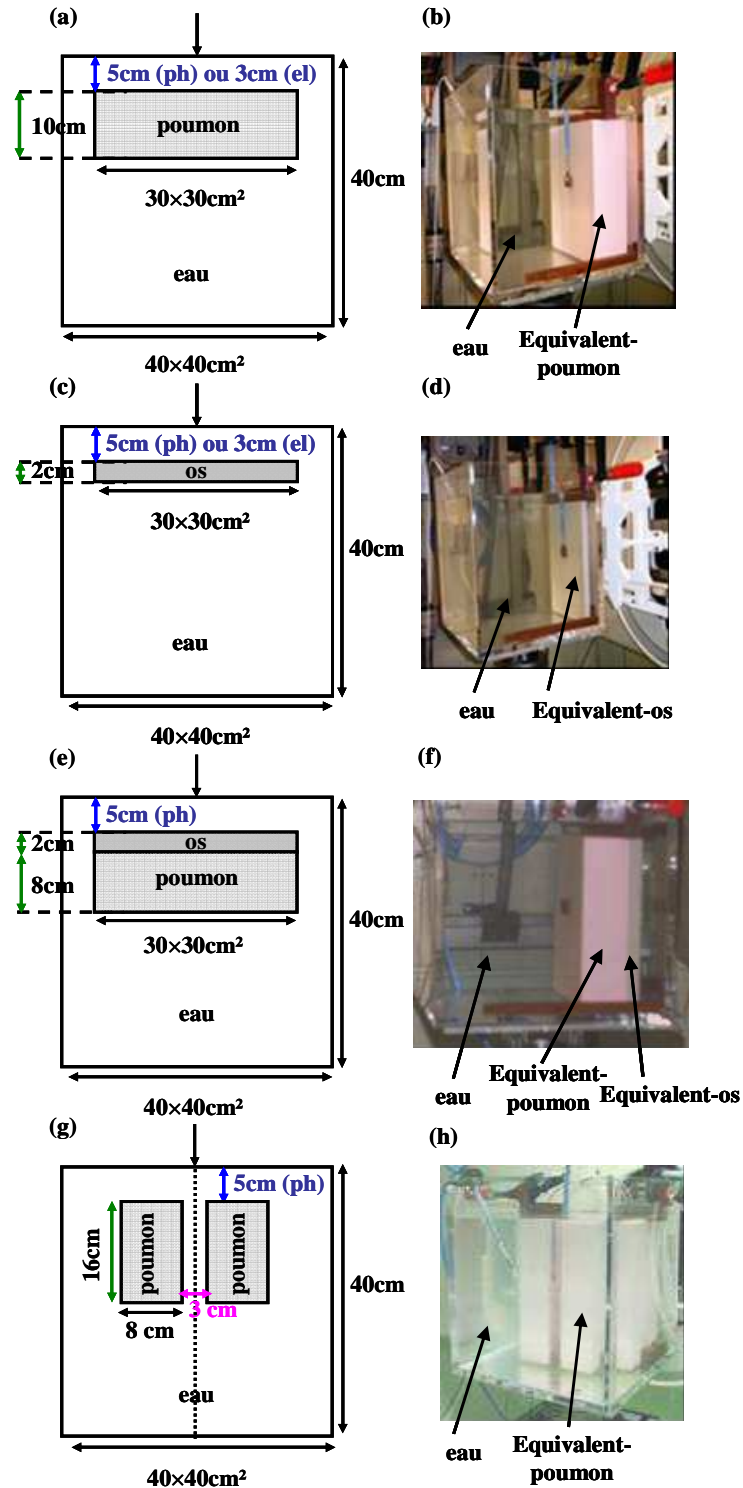


Figure 1 : (a) et (c) schématisent les fantômes hétérogènes eau-poumon-eau et eau-os-eau, contenant respectivement les matériaux équivalent-poumon et équivalent-os. La position de l'hétérogénéité dépend de la qualité du faisceau. (e) schématise le fantôme hétérogène eau-os-poumon-eau. (g) schématise le fantôme hétérogène contenant les matériaux équivalent-poumon en configuration médiastinale. (e) et (g) sont utilisés uniquement en mode photon. (b), (d), (f) et (h) représentent le montage expérimental des fantômes correspondants. Les supports et les calles utilisés pour mettre en place les plaques d'hétérogénéités sont formés d'un matériau équivalent-eau et ont été placés en dehors du faisceau pour éviter toute perturbation de la mesure.

La composition et la densité des matériaux utilisés dans ces fantômes sont données dans le Tableau 1. La configuration des fantômes hétérogènes eau-poumon-eau, eau-os-eau, eau-os-poumon-eau et la configuration médiastinale sont présentées sur la Figure 1. Ces configurations permettent de reproduire la majorité des interfaces hétérogènes rencontrées en radiothérapie : eau/poumon/eau (Figure 1a et 1d), eau/os/eau (Figure 1b) et eau/poumon/os/eau (Figure 1c).

Tableau 1 : Composition et densité des hétérogénéités utilisées dans les fantômes.

Matériau	Masse volumique (g.cm ⁻³)	Composition (% massique)
Equivalent-poumon	0,30	C(60,08) ; O(23,04) ; H(8,33) Mg(4,8) ; N(2,73) ; Cl(1,02)
Equivalent-os	1,80	O(33,55) ; C(30,11) ; Ca(21,57) ; P(7,83) H(3,73) ; Mg(2,09) ; N(1,08) ; Cl(0,04)

2.2. Mesures expérimentales

Les mesures de dose ont été effectuées au LNHB, en prenant des précautions particulières (positionnement géométrique précis, pas de dérive, etc.) afin d'obtenir des résultats les plus précis possible. En effet, il est important de préciser que le dispositif expérimental utilisé diffère de celui d'un service de radiothérapie standard puisqu'il est adapté aux besoins du LNHB pour l'établissement des références nationales. Ce dispositif permet d'obtenir des mesures de dose absolue avec des incertitudes proches de 1 % (1σ) (au lieu de 1,5 % dans des conditions standards d'irradiation).

La validation du code PENFAST a été réalisée pour un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV issus de l'accélérateur linéaire Saturne 43. Le champ de référence de 10×10 cm² a été défini à 100 cm de la source. Les distributions de dose ont été mesurées en milieux homogène et hétérogènes.

2.2.1. Mesures en milieu homogène

Les rendements en profondeur et les profils de dose ont été mesurés dans une cuve à eau de $30 \times 30 \times 30$ cm³ de paroi en PMMA.

Les conditions expérimentales de mesure ont été précédemment décrites dans le Chapitre III, Paragraphe 4.2.

2.2.2. Mesures en milieux hétérogènes

Selon la nature du rayonnement, les rendements en profondeur ont été mesurés en amont et en aval de l'hétérogénéité (Figure 1a-c) à l'aide de CI cylindriques (PTW-31002 et NE-2571) et plates (NACP-02 et PTW-34001). En complément, le dosimètre passif chimique de Fricke¹ a été utilisé pour mesurer la dose absorbée au voisinage des interfaces entre l'eau et l'hétérogénéité. Ce dosimètre, étant essentiellement constitué d'eau, perturbe peu la mesure.

Les rendements en profondeur ont été normalisés par rapport à la dose mesurée à la profondeur de référence dans l'eau, à savoir 10 cm pour le faisceau de photons de 12 MV et 4,2 cm pour le faisceau d'électrons de 18 MeV (Blazy *et al.* 2006).

En outre, pour le faisceau d'électrons, les profils de dose ont été mesurés à l'aide d'une CI cylindrique PTW-31002 à 2,5 cm et 14,5 cm de profondeur dans le fantôme eau-poumon-eau (Figure 1a). Pour le faisceau de photons, les profils ont été mesurés à 22 cm et 25 cm de profondeur dans le fantôme présentant la configuration médiastinale (Figure 1d). Les profils de dose ont été normalisés par rapport à la dose sur l'axe.

Les volumes de détection de chacun des dosimètres utilisés dans cette étude sont précisés dans le Tableau 2.

Tableau 2 : Volumes de détection du dosimètre de Fricke et des CI utilisés dans cette étude.

Dosimètre		Volume de détection (cm ³)
Fricke		2
CI cylindrique	PTW-31002	0,125
	NE-2571	0,690
CI plate	NACP-02	0,250
	PTW-34001	0,350

Les détecteurs n'ont pas été modélisés dans les simulations MC afin de reproduire correctement les phénomènes physiques d'équilibre électronique au voisinage des interfaces, sans la perturbation des détecteurs. Par conséquent, les distributions de dose mesurées ont dû être corrigées de la perturbation du détecteur pour être comparées à celles calculées.

¹ Le dosimètre de Fricke est un dosimètre chimique au sulfate de fer (Fe^{2+} , SO_4^{2-}). Sous l'effet des rayonnements ionisants, les éléments issus de la radiolyse de l'eau oxydent les ions ferreux (Fe^{2+}) en ions ferriques (Fe^{3+}). La concentration en ions Fe^{3+} est alors directement proportionnelle à l'énergie absorbée dans la solution de Fricke.

Les mesures effectuées avec les dosimètres de Fricke, en faisceaux d'électrons et de photons, ont été corrigées de l'influence de la paroi (Blazy 2007).

Les mesures effectuées avec les CI en faisceau d'électrons ont été corrigées du rapport des pouvoirs d'arrêt dans l'eau et dans l'air ($S_{\text{eau,air}}$) suivant le protocole de l'IAEA (2000).

Pour le faisceau de photons, les mesures effectuées avec les CI n'ont pas été corrigées en raison de la faible variation des $S_{\text{eau,air}}$ avec la profondeur (IAEA 2000, Blazy 2007).

Pour les mesures ionométriques relatives, les incertitudes de type A (reproductibilité) sont négligeables par rapport aux incertitudes de type B (erreurs systématiques et aléatoires de l'instrumentation) qui sont estimées à 0,56 % (1σ) pour le faisceau d'électrons et à 0,36 % (1σ) pour le faisceau de photons. Pour les dosimètres de Fricke, les incertitudes associées à la mesure sont estimées à 0,8 % (1σ).

2.3. Simulations Monte Carlo

Les PSF, obtenus lors de l'étape d'ajustement des paramètres initiaux (cf. Chapitre III, Paragraphe 4), ont été utilisés comme données d'entrée pour le calcul des distributions de dose en milieux homogène et hétérogènes.

Pour les calculs de dose avec PENELOPE, les fantômes ont été modélisés avec le programme de géométrie PENGEO (Annexe A) en respectant les caractéristiques physiques et géométriques des différents matériaux. Les paramètres de simulation sont regroupés dans le Tableau 3.

Tableau 3 : Paramètres de simulation MC PENELOPE utilisés pour tous les matériaux dans le cas du faisceau de photons de 12 MV et du faisceau d'électrons de 18 MeV.

Paramètres	Photon (12 MV)	Electron (18 MeV)
C1 = C2	0,05	0,05
Wcc (keV) = Wcr (keV)	10	10
Energies de coupure : e^- , photons, e^+ (keV)	100, 10, 100	100, 10, 100
Techniques de réduction de variance*	NSPLIT = 25	-

* La technique de réduction de variance du « splitting » est uniquement utilisée pour le mode photon.

Pour les calculs de dose avec PENFAST, les fantômes voxélisés ont été générés numériquement en utilisant un programme Fortran qui attribue le matériau et la masse volumique corrects à chaque voxel tels qu'ils sont définis dans PENELOPE et les mesures.

Pour comparer les distributions de dose obtenues avec les deux codes, une taille de voxel identique a été utilisée pour les simulations. Afin de s'affranchir de l'effet de la taille des voxels sur les distributions de dose, des voxels cubiques de taille de côté allant de 2 à 5 mm ont été choisis en fonction de la configuration du fantôme. En effet, dans la géométrie voxélisée, le voxel est une entité homogène définie par un seul type de matériau et une masse volumique unique. Une grande taille de voxel peut donc altérer la distribution des matériaux et des densités dans le fantôme et par la suite modifier les distributions de dose.

3. Résultats et discussions

3.1. Influence de la composition du matériau sur la dose calculée : Ajout de matériau dans le code Monte Carlo PENFAST

Il est à rappeler que le calcul de dose avec le code PENFAST utilise comme donnée d'entrée la géométrie voxélisée du milieu. Chaque voxel est caractérisé par le type de matériau et la masse volumique correspondants. En pratique clinique, ces données sont déterminées à partir des UH de l'image TDM, comme présenté dans le Chapitre I, Paragraphe 5.2.2. Dans cette étude, la géométrie voxélisée des fantômes a été générée numériquement en attribuant, à chaque voxel, un matériau de la base de données du code PENFAST et la masse volumique correcte. La version originale du code PENFAST contient six matériaux, à savoir : l'air, l'eau, l'os compact, le poumon, le titane et le plomb.

Les parois des fantômes sont composées de PMMA, matériau indisponible dans la base de données de la version standard du code PENFAST.

Dans un premier temps, pour les simulations PENFAST, les voxels des parois ont été définis avec le matériau eau (le matériau ayant la densité la plus proche du PMMA) et la densité correcte ($1,19 \text{ g.cm}^{-3}$). En conséquence, une différence relative allant jusqu'à 8 % a été remarquée, dans la paroi d'entrée en PMMA, entre la dose calculée avec PENELOPE et celle calculée avec PENFAST. Récemment, Verhaegen et Devic (2005) ont montré qu'une imprécision sur la composition atomique et la masse volumique entraîne des erreurs sur la dose allant jusqu'à 10 % pour des faisceaux de photons (6 et 15 MV) et jusqu'à 30 % pour des faisceaux d'électrons (18 MeV).

Par conséquent, dans un second temps, nous avons généré les tables de données (distributions angulaires de diffusion multiple et distributions de perte d'énergie) et les sections efficaces du PMMA pour une large gamme d'énergie et d'angle. Ces données ont été générées à l'aide de

simulations MC utilisant des sous-routines du code PENELOPE. Ce matériau a ensuite été inclus dans la base de données de PENFAST. Lorsque le matériau et la densité attribués aux voxels sont corrects, les différences constatées précédemment dans le PMMA disparaissent.

Le Tableau 4 montre les différences relatives moyennes entre les doses obtenues dans le PMMA (à 0,2 cm de profondeur dans la paroi de la cuve), avec PENELOPE et PENFAST, avant et après la modification de ce dernier, pour plusieurs fantômes étudiés. A titre d'exemple, la Figure 2 illustre ces résultats pour les modes photon et électron dans le cas de la cuve homogène.

Tableau 4 : Différence relative moyenne entre les doses obtenues, dans le PMMA, avec les deux codes PENELOPE et PENFAST, avant et après l'introduction de ce matériau dans PENFAST.

Faisceau	Fantôme	Différence relative moyenne (%)	
		PENELOPE vs (PENFAST avant)	PENELOPE vs (PENFAST après)
Photon (12MV)	Eau	7,2	0
	Eau-poumon-eau	7,9	0
	Eau-os-eau	7,2	0
	Eau-os-poumon-eau	7,2	0
Electron (18 MeV)	Eau	4,0	0,1
	Eau-poumon-eau	3,9	0,1
	Eau-os-eau	4,0	0,1

La comparaison des sections efficaces totales (pour toutes les interactions utilisées dans PENELOPE) entre le PMMA et l'eau (Figures 3a et b) montre des différences relatives supérieures à 100 % entre les deux distributions. Ces différences sont dues principalement au carbone présent à 33,33 % dans la molécule du PMMA alors que la molécule de l'eau ne contient pas cet élément, comme le montrent les Figures 3c et d.

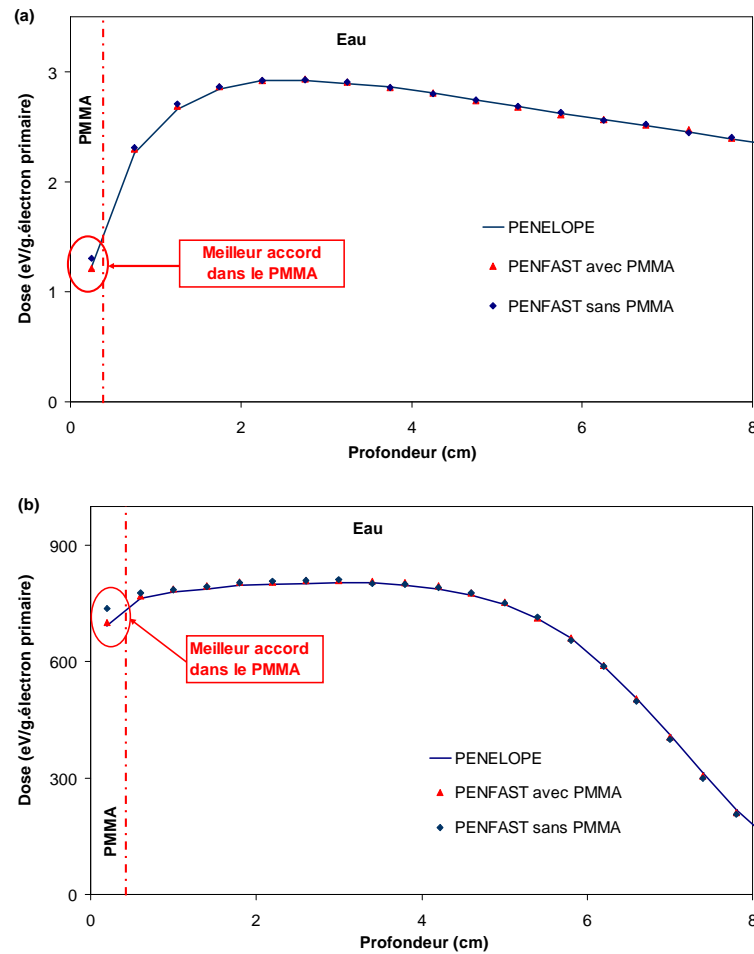


Figure 2 : Comparaison des courbes de dose absorbée sur l'axe calculée avec PENELOPE et PENFAST avant et après l'introduction du PMMA, pour un faisceau de photons de 12 MV (a) et un faisceau d'électrons de 18 MeV (b). Cas de la cuve à eau avec une paroi d'entrée de 0,4 cm de PMMA.

Ces résultats confirment ce à quoi l'on s'attendait, à savoir que la différence entre les compositions atomiques crée des différences entre les sections efficaces correspondantes qui elles-mêmes régissent les interactions des rayonnements dans le matériau. Ces différences entraînent ainsi des différences entre les doses calculées dans les matériaux impliqués.

On peut en conclure que pour obtenir un calcul précis de dose par MC, la composition atomique et la masse volumique de chaque matériau doivent être absolument respectées. Ceci implique que la correspondance entre les UH et la nature des matériaux biologiques doit être connue à l'avance.

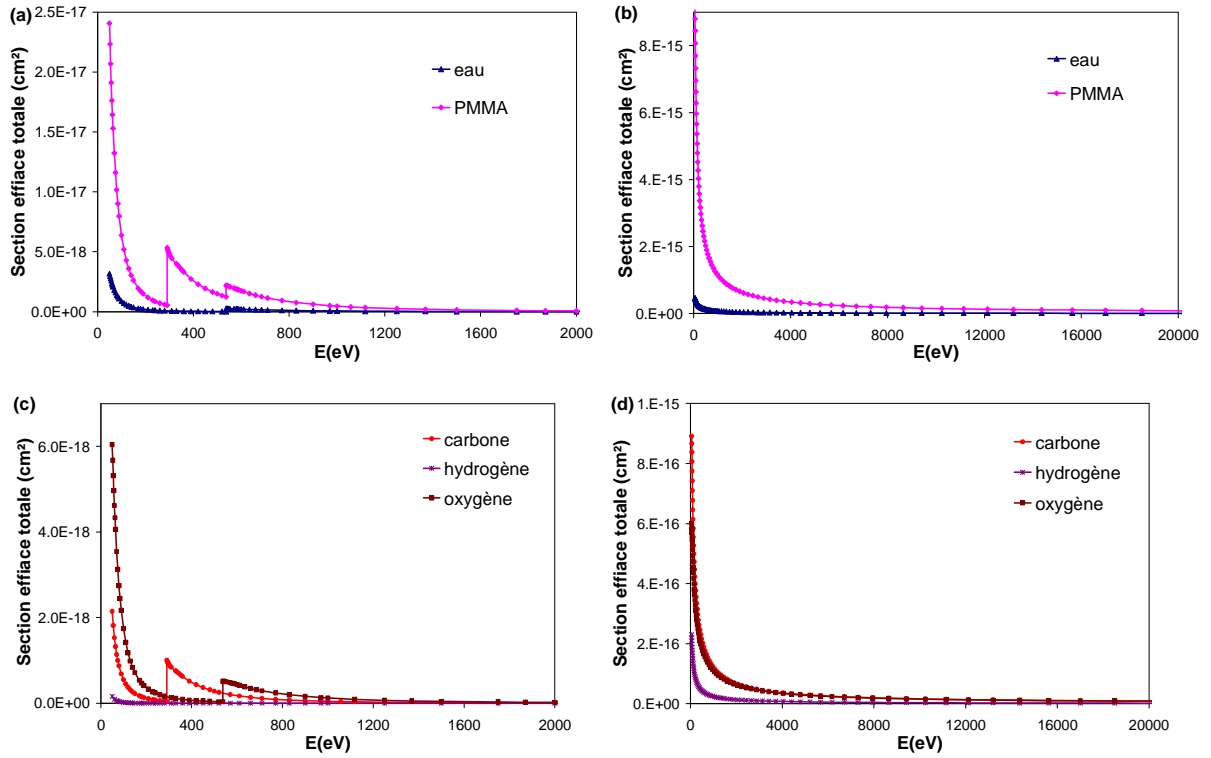


Figure 3 : Comparaison des sections efficaces totales (pour toutes les interactions) entre le PMMA et l'eau en fonction de l'énergie des photons (a) et des électrons (b). (c) et (d) représentent les sections efficaces totales des éléments individuels en fonction de l'énergie des photons et des électrons respectivement.

Les résultats exposés dans les prochains paragraphes ont été obtenus avec la version du code PENFAST modifiée pour inclure le PMMA dans sa base de données.

3.2. Comparaisons des distributions de dose

Dans cette étude, les mesures expérimentales des rendements en profondeur et des profils de dose ont été comparées aux résultats simulés obtenus avec le code MC généraliste PENELOPE ainsi que le code MC rapide PENFAST. Les comparaisons ont été réalisées, en milieux homogène et hétérogènes, pour les deux faisceaux étudiés (un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV).

3.2.1. Milieu homogène

3.2.1.1. Faisceau de photons de 12 MV

La Figure 4 illustre la comparaison entre les distributions de dose mesurées et calculées avec PENELOPE et PENFAST dans la cuve à eau. Les calculs avec les deux codes MC ont été

effectués en considérant des voxels cubiques de 4 mm de côté. Les incertitudes statistiques associées aux calculs MC (PENELOPE et PENFAST) sont inférieures à 0,9 % (1σ) dans les régions de forte dose (entre 50 % et 100 % de la dose maximale) et inférieures à 3,0 % (1σ) ailleurs.

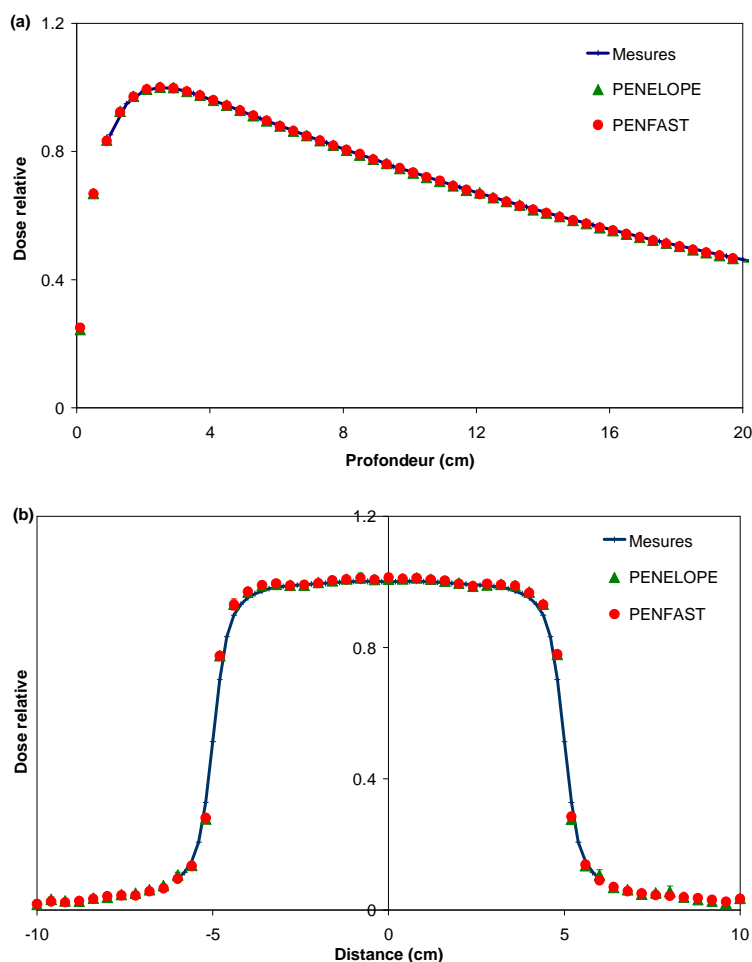


Figure 4 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec les codes MC PENELOPE et PENFAST (photon 12 MV, champ 10×10 cm²).

Le test de l'index gamma, avec les valeurs des critères d'acceptabilité égales à 1 % (écart de dose) et 1 mm (écart de distance), a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose calculées et mesurées dans l'eau. La Figure 5 représente les résultats du test de l'index gamma correspondant à ces mesures.

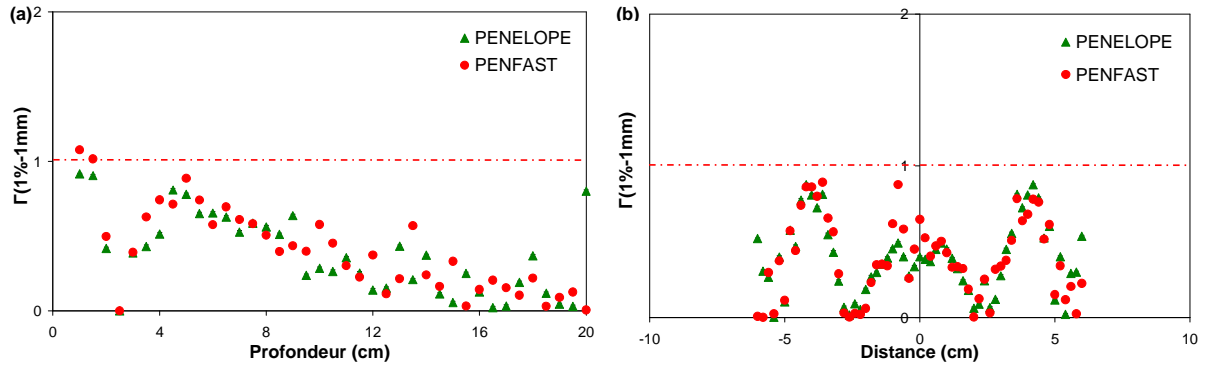


Figure 5 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) calculés avec les codes MC PENELOPE et PENFAST (photon 12 MV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

L'examen des Figures 4 et 5 met en évidence les constatations suivantes :

- Un bon accord a été trouvé entre les résultats des deux codes MC PENFAST et PENELOPE. Les écarts sont inférieurs à 1 % et 1 mm.
- Les résultats du test de l'index gamma montrent un bon accord entre les résultats du code PENFAST et ceux obtenus expérimentalement. Toutefois, il est important de préciser que le résultat du test de l'index gamma est rejeté pour le premier point du rendement en profondeur (profondeur de 1 cm, Figure 5a). Etant donné que ce point est situé dans la zone de mise en équilibre électronique (ou « build-up »), le rejet du test de l'index gamma n'est donc pas rédhibitoire.

3.2.1.2. Faisceau d'électrons de 18 MeV

La comparaison entre les distributions de dose mesurées et celles calculées avec PENELOPE et PENFAST dans la cuve à eau est présentée sur la Figure 6. Des voxels cubiques de 4 mm de côté ont été utilisés pour les calculs avec les deux codes MC. Les incertitudes statistiques (1σ) associées aux calculs MC (PENELOPE et PENFAST) sont inférieures à 0,4 % (1σ) dans les régions de forte dose (entre 50 % et 100 % de la dose maximale) et inférieures à 1,3 % (1σ) ailleurs.

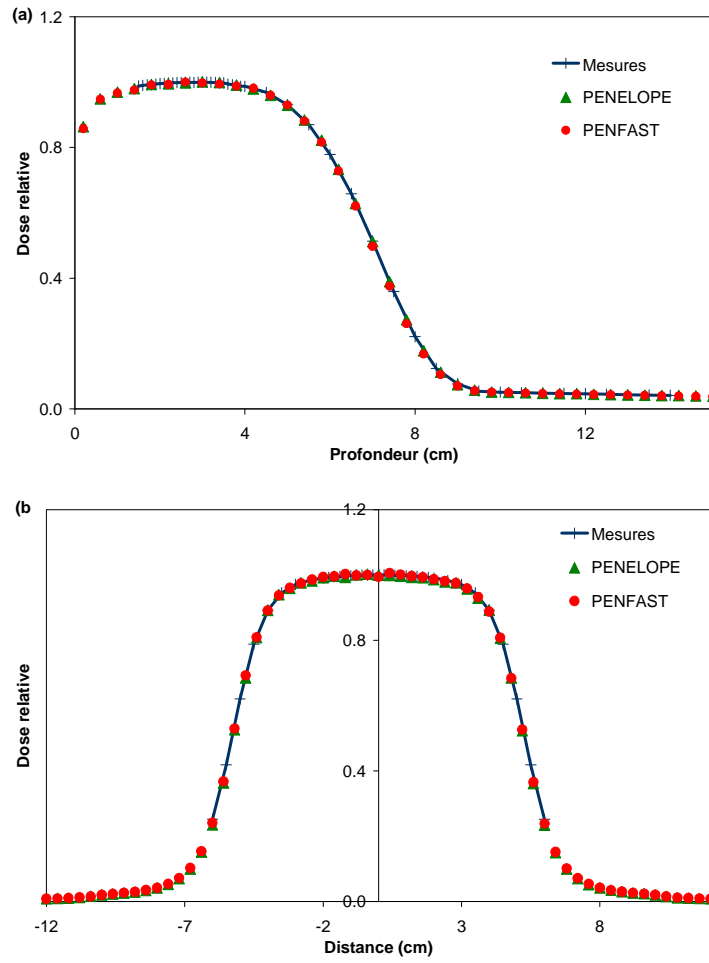


Figure 6 : Rendements en profondeur (a) et profils de dose (b) mesurés et calculés avec les codes MC PENELOPE et PENFAST (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Les résultats du test de l'index gamma sont représentés sur la Figure 7.

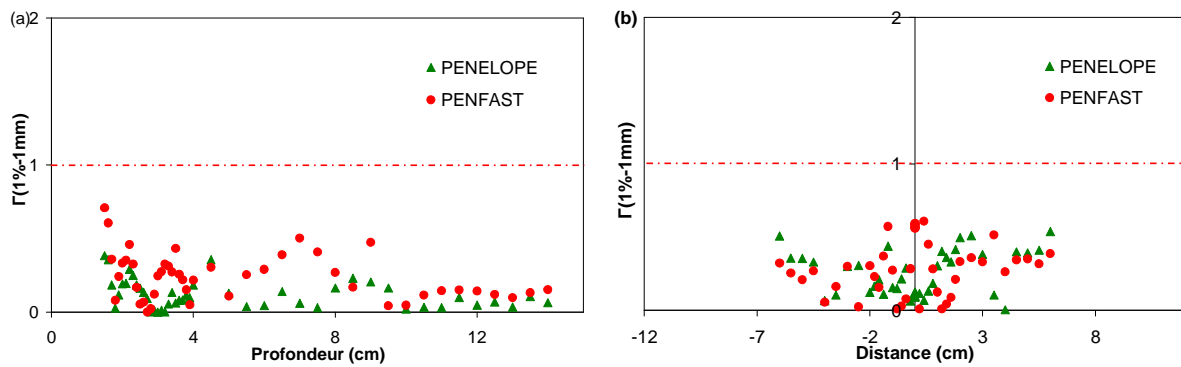


Figure 7 : Résultats du test de l'index gamma pour les rendements en profondeur (a) et les profils de dose (b) calculés avec les codes MC PENELOPE et PENFAST (électron 18 MeV, champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$).

Cette étude a montré une bonne concordance entre les résultats des deux codes MC PENFAST et PENELOPE d'une part, et entre les résultats du code PENFAST et les mesures expérimentales d'une autre part.

3.2.2. Milieux hétérogènes

3.2.2.1. Faisceau de photons de 12 MV

La Figure 8 illustre la comparaison entre les rendements en profondeur mesurés et ceux calculés avec PENELOPE et PENFAST dans les fantômes eau-poumon-eau (Figure 1a), eau-os-eau (Figure 1b) et eau-os-poumon-eau (Figure 1c). Les calculs avec les deux codes ont été effectués en considérant des voxels cubiques de 5 mm de côté. Le Tableau 5 regroupe les incertitudes statistiques (1σ) associées aux calculs ainsi que les différences relatives maximales obtenues entre les mesures et les calculs MC (PENELOPE et PENFAST) pour les trois fantômes étudiés.

L'analyse de la Figure 8 et du Tableau 5 montre que :

- Un très bon accord a été globalement trouvé entre les résultats des deux codes MC PENELOPE et PENFAST, dans l'eau ainsi qu'à l'intérieur des hétérogénéités. La différence relative maximale est inférieure à 1 % et 1 mm.
- Les résultats du code PENFAST sont en bon accord avec les mesures expérimentales (ionométriques et chimiques). La différence relative maximale a été observée au voisinage des hétérogénéités, où elle atteint 1,2 % pour les fantômes eau-poumon-eau et eau-os-eau et 1,7 % pour le fantôme eau-os-poumon-eau. En s'éloignant de l'hétérogénéité, la différence diminue rapidement. Ces différences peuvent s'expliquer en partie par le fait que la CI cylindrique tend à sous-estimer la dose en raison de l'atténuation des électrons de faible énergie par ses parois (voir la Figure 8b, à des profondeurs de 7,3 à 8,5 cm près de l'interface os/eau). Ces électrons sont cependant pris en compte dans les simulations puisque le détecteur n'a pas été modélisé.

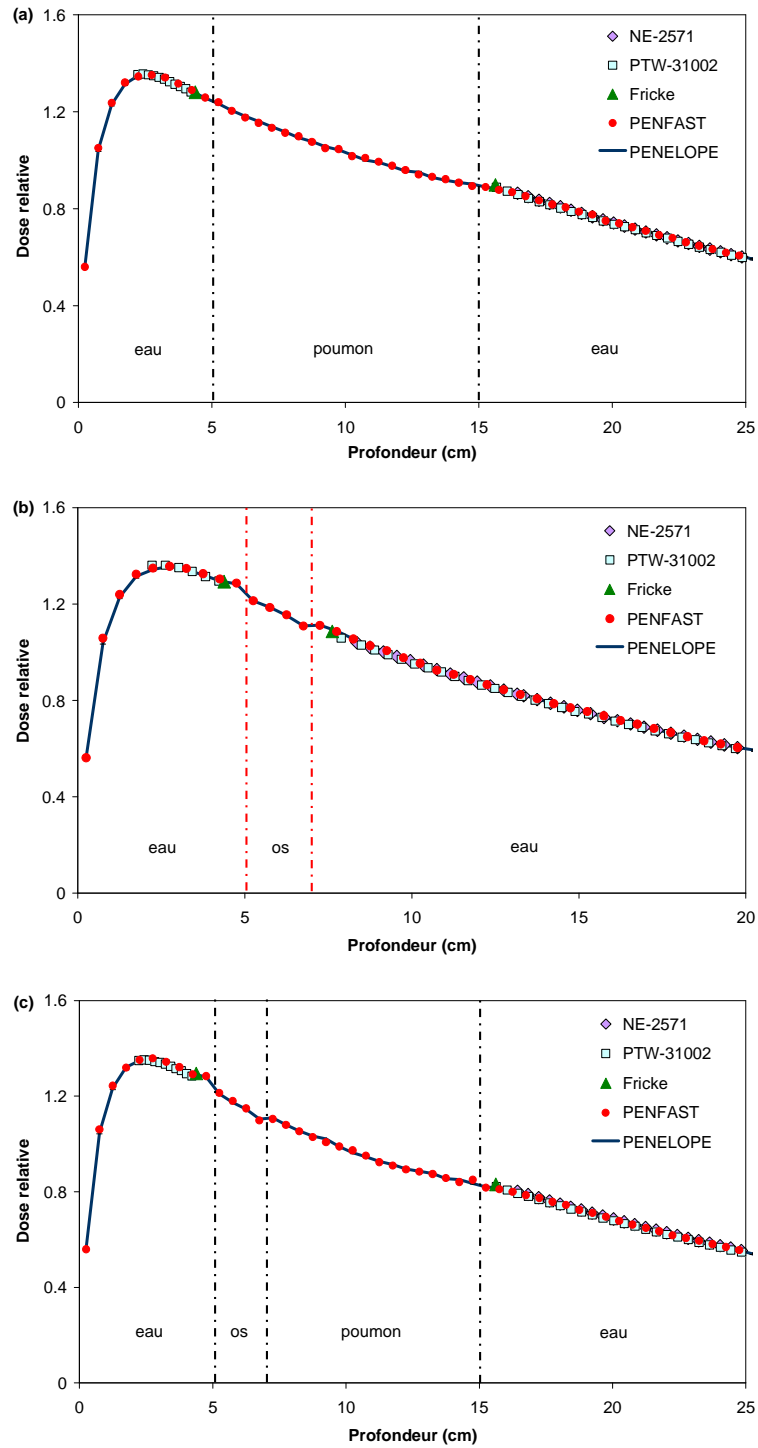


Figure 8 : Faisceau de photons de 12 MV : Rendements en profondeur calculés et mesurés dans les fantômes eau-poumon-eau (a), eau-os-eau (b) et eau-os-poumon-eau (c).

Tableau 5 : Faisceau de photons de 12 MV : La gamme d'incertitude statistique (1σ) associée aux calculs MC pour les fantômes eau-poumon-eau, eau-os-eau et eau-os-poumon-eau. La différence relative maximale entre les mesures et les calculs MC PENELOPE et PENFAST est également indiquée.

Fantôme	Gamme d'incertitude statistique (1σ) (%)		Différence relative maximale (%)	
	PENELOPE	PENFAST	PENELOPE	PENFAST
Eau-poumon-eau	0,37 - 0,83	0,40 - 0,80	1,1	1,2
Eau-os-eau	0,45 - 0,83	0,43 - 0,80	0,7	1,2
Eau-os-poumon-eau	0,38 - 0,81	0,38 - 0,83	1,5	1,7

La Figure 9 montre la comparaison entre les profils de dose mesurés et ceux calculés avec PENELOPE et PENFAST à 22 cm et 25 cm de profondeur derrière les hétérogénéités équivalent-poumon, dans le fantôme présentant la configuration médiastinale (Figure 1d). Les calculs avec les deux codes ont été effectués en considérant des voxels cubiques de 2 mm de côté. L'incertitude statistique (1σ) associée aux résultats de MC est inférieure à 1 % dans la région centrale des profils et de 1,5 à 3 % ailleurs (dans la pénombre et en dehors du champ). Globalement, un bon accord a été trouvé entre les mesures expérimentales et les résultats de MC (PENFAST, et PENELOPE) puisque les écarts ne dépassent pas 2 % et 2 mm.

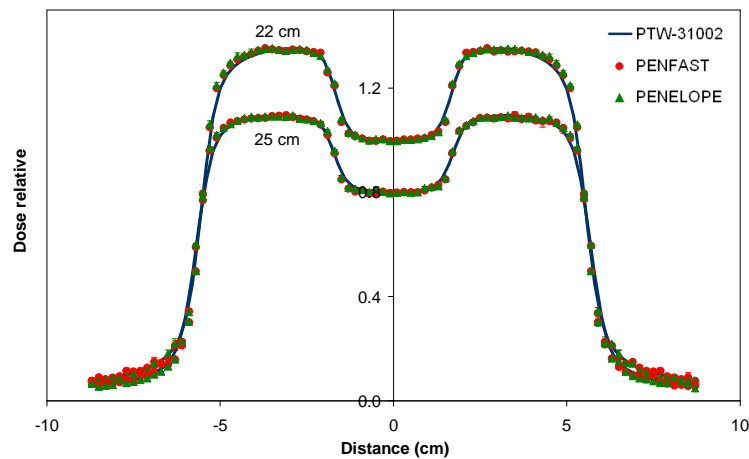


Figure 9 : Faisceau de photons de 12 MV : Profils de dose calculés et mesurés aux profondeurs indiquées, dans le fantôme présentant la configuration médiastinale. Les profils de dose à 25 cm de profondeur ont été multipliés par un facteur 0,8 pour éviter le chevauchement.

3.2.2.2. Faisceau d'électrons de 18 MeV

La comparaison entre les rendements en profondeur mesurés et ceux calculés avec PENELOPE et PENFAST, dans les fantômes eau-poumon-eau (Figure 1a) et eau-os-eau

(Figure 1b), est présentée sur la Figure 10. Des voxels cubiques de 4 mm et 2 mm de côté ont été choisis pour les calculs dans les fantômes eau-poumon-eau et eau-os-eau respectivement. Les incertitudes statistiques (1σ) associées aux calculs ainsi que les différences relatives maximales observées entre les mesures et les calculs MC (PENELOPE et PENFAST) sont regroupées dans le Tableau 6 pour les deux fantômes étudiés.

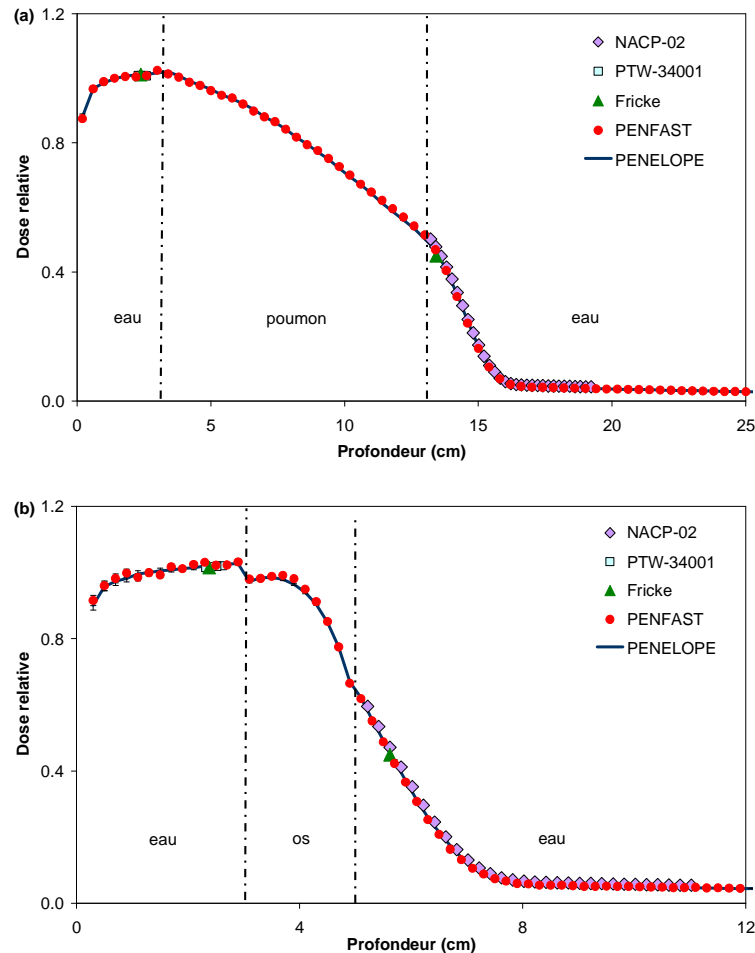


Figure 10 : Faisceau d'électrons de 18 MeV : Rendements en profondeur calculés et mesurés dans les fantômes eau-poumon-eau (a) et eau-os-eau (b).

L'analyse de ces résultats met en évidence les constatations suivantes :

- D'une manière générale, les résultats du code MC PENFAST, dans l'eau ainsi qu'à l'intérieur des hétérogénéités, sont en très bon accord avec ceux du code PENELOPE. La différence relative maximale est inférieure à 1 % et 1 mm.
- En outre, les résultats du code PENFAST sont en bonne concordance avec les différentes mesures ionométriques et chimiques. La différence relative maximale est de 1,8 % pour le fantôme eau-os-eau et de 1,9 % pour le fantôme eau-poumon-eau. Ces différences sont

légèrement supérieures à celles obtenues pour le mode photon 12 MV à cause du fort gradient de dose observé derrière les hétérogénéités dans le cas du mode électron 18 MeV. Ces différences sont tout de même inférieures au critère d'acceptabilité de 2 % retenu.

Tableau 6 : Faisceau d'électrons de 18 MeV : La gamme d'incertitude statistique (1σ) associée aux calculs MC pour les fantômes eau-poumon-eau et eau-os-eau. La différence relative maximale entre les mesures et les calculs MC PENELOPE et PENFAST est également indiquée.

Fantôme	Gamme d'incertitude statistique (1σ) (%)		Différence relative maximale (%)	
	PENELOPE	PENFAST	PENELOPE	PENFAST
Eau-poumon-eau	0,21 - 1,41	0,26 - 1,49	1,8	1,9
Eau-os-eau	0,36 - 3,3	0,43 - 3,90	1,7	1,8

La Figure 11 montre la comparaison entre les profils de dose mesurés et ceux calculés avec PENELOPE et PENFAST à 2,5 cm (en amont de l'hétérogénéité équivalent-poumon) et 14,5 cm de profondeur (derrière l'hétérogénéité équivalent-poumon) dans le fantôme eau-poumon-eau. L'incertitude statistique moyenne (1σ) associée aux résultats de MC est de l'ordre de 0,4 % dans la région centrale des profils et de 0,5 à 2 % ailleurs (dans la pénombre et en dehors du champ).

Un bon accord a été constaté entre les mesures expérimentales et les résultats de MC (PENFAST, et PENELOPE). Les différences relatives sont généralement inférieures à 2 % et 2 mm. La différence relative maximale a été observée à la profondeur 14,5 cm derrière l'hétérogénéité, en particulier dans les régions hors-champ.

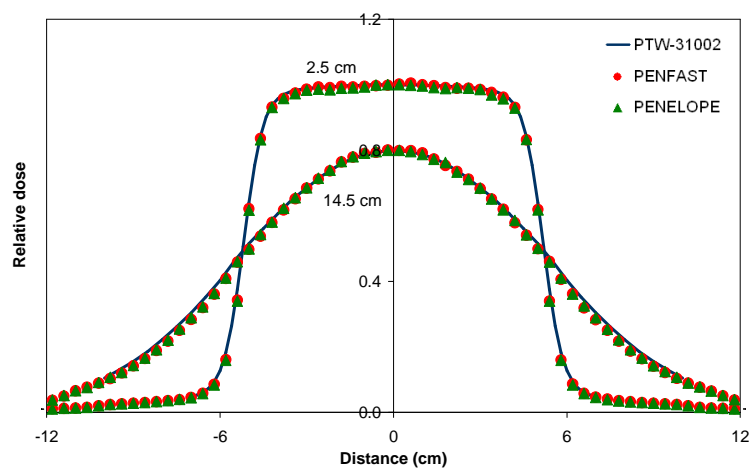


Figure 11 : Faisceau d'électrons de 18 MeV : Profils de dose calculés et mesurés aux profondeurs indiquées, dans le fantôme eau-poumon-eau. Les profils de dose à 14,5 cm de profondeur ont été multipliés par un facteur 0,8 pour éviter le chevauchement.

Ces résultats valident la physique du code MC rapide PENFAST destiné au calcul de dose en radiothérapie. Le paragraphe suivant évalue le gain en temps de calcul obtenu avec PENFAST par rapport au code MC généraliste PENELOPE.

3.3. Comparaison du temps de calcul entre PENELOPE et PENFAST

Une comparaison du temps de calcul de dose entre PENELOPE et PENFAST est présentée dans les Tableaux 7 et 8 pour les faisceaux de photons et d'électrons respectivement. Les tests ont été effectués dans un fantôme homogène d'eau et dans les fantômes hétérogènes eau-poumon-eau, eau-os-eau et eau-os-poumon-eau. Les calculs ont été réalisés dans les mêmes conditions, sur un « cluster » de 22 processeurs (AMD Opteron 64 bits, 8 Go de RAM et 2,4 GHz). Le même PSF pré-calculé a été utilisé pour les deux calculs de dose avec PENELOPE et PENFAST. En outre, le même nombre d'histoires simulées et de voxels ont été utilisés pour les calculs avec les deux codes. Le temps CPU présenté dans les Tableaux 7 et 8 est le temps de calcul nécessaire pour obtenir une incertitude statistique moyenne de 1 % (1σ) dans les régions où la dose est supérieure à 50 % de sa valeur maximale.

Tableau 7 : Comparaison du temps CPU entre les deux codes MC PENELOPE et PENFAST en fonction du nombre de voxels utilisés pour définir le fantôme. Cas du faisceau de photons de 12 MV.

Fantôme	Nombre de voxels (millions)	Temps CPU PENELOPE (h)	Temps CPU PENFAST (min)	Rapport PENELOPE / PENFAST
Eau	0,512	1,9	7	16,3
Eau-poumon-eau	0,512	3,4	10	20,4
Eau-os-eau	0,512	3,7	11	20,2
Eau-os-poumon-eau	0,512	4	17	14,1

Tableau 8 : Comparaison du temps CPU entre les deux codes MC PENELOPE et PENFAST en fonction du nombre de voxels utilisés pour définir le fantôme. Cas du faisceau d'électrons de 18 MeV.

Fantôme	Nombre de voxels (millions)	Temps CPU PENELOPE (h)	Temps CPU PENFAST (min)	Rapport PENELOPE / PENFAST
Eau	1	0,3	2	9,0
Eau-poumon-eau	1	0,7	4	10,5
Eau-os-eau	8	1,5	10	9,0

L'analyse de ces tableaux met en évidence que le temps de calcul requis par PENFAST est généralement de l'ordre de quelques minutes, alors que PENELOPE nécessite plusieurs heures sur les 22 processeurs. Selon la configuration simulée, PENFAST est environ 14 à 20

fois plus rapide que PENELOPE en mode photon, et 9 à 10 fois plus rapide en mode électron. La raison principale du gain en temps de calcul avec PENFAST par rapport au code généraliste PENELOPE est l'utilisation de données d'interactions (distributions angulaires de diffusion multiple et distributions de perte d'énergie pour tous les matériaux) pré-calculées dans PENFAST, alors que ces données sont déterminées lors de la simulation du transport des particules dans PENELOPE (comme dans tout autre code MC généraliste). De cette manière, une grande partie du temps de calcul est effectuée en amont du calcul avec PENFAST (Salvat *et al.* 2008a, 2008b, en prep.).

Il est difficile de faire une véritable comparaison du temps de calcul entre PENFAST et les autres codes MC dédiés à la planification du traitement en radiothérapie puisque le temps de calcul dépend de plusieurs paramètres tels que la qualité du faisceau, le nombre d'histoires simulées, le nombre et la taille de voxels, la taille du champ, les paramètres de simulation et les caractéristiques du processeur. Toutefois, pour avoir une idée sur la différence entre les différents codes, le temps de calcul nécessaire pour les systèmes mentionnés précédemment, dans le Chapitre I, Paragraphe 4.2, est généralement de l'ordre de quelques minutes pour un faisceau d'électrons et de quelques heures pour un faisceau de photons (Neuenschwander *et al.* 1995, Kawrakow *et al.* 1996, Fippel 1999, Kawrakow 2000b, Sempau *et al.* 2000, Siebers *et al.* 2000, Hartman Siantar *et al.* 2001, Chetty *et al.* 2007). Comparé à ces systèmes, PENFAST est ainsi en mesure de fournir des résultats en des temps de calcul comparables pour les électrons et des temps plus courts pour les photons. Un atout important de PENFAST, qui le différencie des autres codes MC rapides, est qu'il n'est pas fondé sur des modèles de sources virtuelles ou de « kernels » calculés par MC pour effectuer la planification du traitement, mais sur l'utilisation d'une description détaillée de la géométrie de l'accélérateur et la simulation MC complète de la sortie de la section de déviation magnétique jusqu'au patient (Salvat *et al.* 2008a, 2008b, en prep.). Cette approche permet un calcul précis de la dose délivrée comme démontré dans cette étude.

4. Conclusions

Les résultats de ce chapitre montrent que, pour les faisceaux de photons et d'électrons, PENFAST fournit des résultats qui sont équivalents, en termes de précision (avec des écarts inférieurs à 1 % et 1 mm), à ceux obtenus à l'aide de PENELOPE. Selon la qualité du

faisceau et la géométrie modélisée, le code PENFAST est 9 à 20 fois plus rapide que le code PENELOPE.

En outre, le bon accord entre les simulations PENFAST et les mesures expérimentales en milieux homogène (écarts inférieurs à 1 % et 1 mm) et hétérogènes (écarts généralement inférieurs à 2 % et 2 mm) a montré la capacité du code PENFAST à calculer une dose précise, en modes photon et électron, même en situation complexe de perturbation de la fluence dans les régions de déséquilibre électronique en particulier au voisinage des interfaces entre les différents matériaux. Ces résultats valident ainsi, pour les configurations étudiées, les modèles physiques inclus dans le code de calcul de dose MC PENFAST.

Par contre, bien que le code MC PENFAST soit validé en regard des critères d'acceptabilité retenus, plusieurs remarques peuvent être faites.

Tout d'abord, les écarts obtenus avec PENFAST par rapport aux mesures sont légèrement supérieurs à ceux obtenus avec le code PENELOPE. Ce phénomène s'explique par la simplification de la physique faite dans PENFAST afin de calculer plus vite. Ces écarts rentrent tout de même largement dans les critères d'acceptabilité retenus.

Ensuite, dans le cadre de la présente validation, le PMMA a été ajouté à la base de données utilisée par PENFAST et les fantômes ont été générés numériquement pour avoir les caractéristiques physiques et géométriques correctes dans la géométrie voxélisée. Dans la version actuelle de PENFAST disponible pour les applications cliniques, la géométrie voxélisée sera définie à partir des images TDM moyennant des correspondances UH-matériau et UH-masse volumique. La vérification de la caractérisation de la géométrie voxélisée, notamment lorsqu'un matériau sera différent de ceux de la base de données (eau, os, poumon, air), paraît alors indispensable pour valider le calcul de dose dans le TPS-MC final. Cette étape a été réalisée lors de la validation clinique du TPS-MC qui fera l'objet du prochain chapitre.

Chapitre V

EVALUATION DU SYSTEME DE PLANIFICATION DE TRAITEMENT PAR MONTE CARLO EN CONDITIONS CLINIQUES

1. Introduction

Lors du précédent chapitre, la physique du code MC PENFAST a été validée en utilisant des fantômes numériques de caractéristiques réelles. Le but du présent chapitre est d'évaluer le TPS ISOgray™ utilisant la méthode de calcul de dose par MC PENFAST (appelé TPS-MC par la suite) en conditions cliniques tout en identifiant les points critiques. Dans cette étude, le calcul de dose a été effectué à partir des images TDM des fantômes hétérogènes. La conversion de l'information dans l'image TDM (UH) en données de simulation MC (matériau et masse volumique requis pour chaque voxel) a ainsi été évaluée.

Cette étude a été réalisée pour le mode photon 25 MV et le mode électron 9 MeV issus de l'accélérateur linéaire clinique Primus installé au CAL. Une attention toute particulière a été portée sur les champs de taille réduite puisqu'ils sont de plus en plus utilisés avec le développement de la RCMi et puisque le calcul de dose avec les méthodes conventionnelles est souvent imprécis à cause du manque d'équilibre électronique latéral (Ma *et al.* 1999, Carrasco *et al.* 2004, Martens 2002b). De ce fait, en plus des champs de référence 10×10 cm², les champs de 4×4 cm² et 6×6 cm² pour les modes photon 25 MV et électron 9 MeV ont été respectivement étudiés. Les distributions de dose obtenues dans le TPS-MC à partir des images TDM ont été comparées avec celles calculées à partir des fantômes hétérogènes numériques ainsi qu'avec celles mesurées par des films radiographiques. Le calcul de dose a été effectué en utilisant les PSF déjà validés en milieu homogène dans le Chapitre III, Paragraphe 5.

La première partie de ce chapitre décrit la configuration des fantômes utilisés dans cette étude ainsi que les conditions expérimentales de mesures et les paramètres de simulation MC. Les résultats des tests d'évaluation dosimétrique du TPS-MC sont présentés dans la deuxième

partie de ce chapitre. La dernière partie présente une étude permettant d'évaluer l'intérêt de l'ajout de nouveaux matériaux dans le TPS-MC.

2. Matériels et méthodes

2.1. Fantômes utilisés

Les fantômes parallélépipédiques utilisés pour l'évaluation du calcul de dose dans le TPS-MC sont composés de plaques (CIRS) équivalent-eau, équivalent-poumon et équivalent-os. Les plaques sont serrées les unes aux autres afin de limiter la perturbation de la couche d'air inter-plaques. La configuration des fantômes hétérogènes utilisés en mode photon et en mode électron sont présentées sur la figure 1. Le Tableau 1 regroupe l'ensemble des caractéristiques des matériaux utilisés.

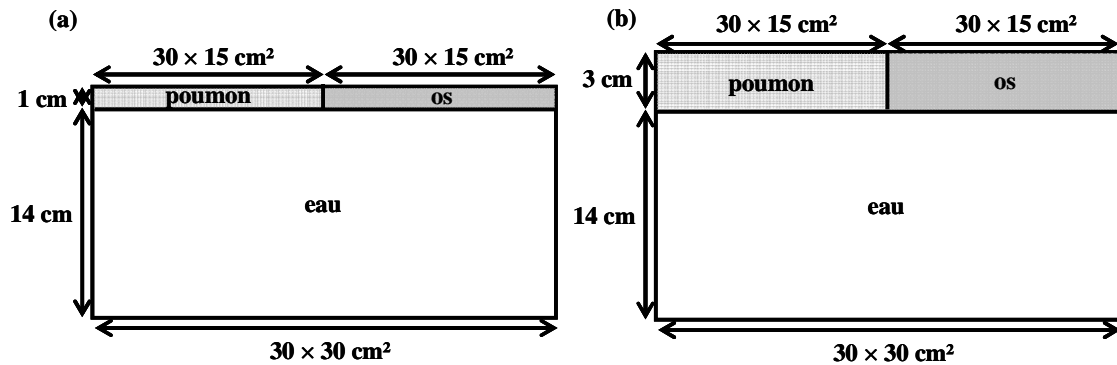


Figure 1 : Fantômes hétérogènes composés de plaques équivalent-eau, équivalent-poumon et équivalent-os, pour le mode électron (a) et le mode photon (b).

Tableau 1 : Caractéristiques des matériaux utilisés dans les fantômes.

Matériau	Masse volumique (g.cm ⁻³)	Composition (% massique)
Equivalent-eau	1,00	O(88,89) ; H(11,11)
Equivalent-poumon	0,30	C(60,08) ; O(23,04) ; H(8,33) Mg(4,8) ; N(2,73) ; Cl(1,02)
Equivalent-os	1,92	O(43,5) ; Ca(22,5) ; C(15,5) ; P(10,3) ; N(4,2) H(3,4) ; S(0,3) ; Mg(0,2) ; Na(0,1)

2.2. Mesures expérimentales

Dans cette étude, les mesures dans les fantômes hétérogènes ont été effectuées dans le service de radiothérapie du CAL dans des conditions standards d'irradiation.

La mesure expérimentale des profils de dose dans les fantômes hétérogènes a été réalisée à l'aide de films radiographiques. Il s'agit de films à émulsion argentique. Cet instrument est le plus répandu en radiothérapie pour des mesures de doses relatives de bonne résolution spatiale dans un plan. L'épaisseur du film de quelques centaines de micromètres permet de l'insérer facilement entre les plaques équivalent-tissu et de ne pas perturber la mesure, sous réserve qu'il soit placé perpendiculairement au faisceau. Dans le cas contraire, une large atténuation du faisceau est observée dans le prolongement du film. Les films utilisés dans cette étude sont du type KODAK EDR2 (acronyme d'Extended Dose Range).

Pour mesurer expérimentalement les profils de dose derrière les hétérogénéités, les films radiographiques ont été placés entre les plaques équivalent-eau perpendiculairement au faisceau.

Pour le mode électron 9 MeV, les deux champs 6×6 et 10×10 cm², définis à 100 cm de la source, ont été étudiés. Les profils de dose ont été mesurés à la profondeur de 3 cm derrière les hétérogénéités (figure 1a), pour une distance source-surface du fantôme de 100 cm.

Pour le mode photon 25 MV, les deux champs 4×4 et 10×10 cm² ont été étudiés. Les profils de dose ont été mesurés à la profondeur de 5 cm (figure 1b), pour une distance source-surface du fantôme de 95 cm.

Pour les comparaisons avec les calculs MC, tous les profils de dose ont été normalisés par rapport à la dose maximale. Les incertitudes associées aux mesures relatives par film sont de l'ordre de 1,5 % (1σ).

2.3. Simulations Monte Carlo

Les PSF validés dans le Chapitre III ont été utilisés comme données d'entrée pour le calcul de dose par MC dans les fantômes hétérogènes.

Les distributions de dose calculées dans le TPS-MC à partir des images TDM ont été comparées à celles calculées à partir des fantômes numériques. De ce fait, l'influence de la conversion des UH en données de simulation (matériau et densité) sur les distributions de dose a été évaluée. Pour cette comparaison, nous distinguons les deux cas suivants :

- Pour les calculs de dose effectués à partir des images TDM, les fantômes hétérogènes (Figure 1) ont été scannés par un tomodensitomètre en mode séquentiel avec des coupes transverses de 2 mm d'épaisseur. Ces images TDM ont été ensuite introduites dans le

TPS-MC afin d'être converties en géométries voxélisées utilisées comme données d'entrée pour le calcul des distributions de dose.

- Pour les calculs de dose effectués à partir des fantômes numériques, les fantômes voxélisés ont été générés numériquement afin d'attribuer les caractéristiques physiques (matériau, masse volumique) correctes aux voxels telles qu'elles sont réellement utilisées dans les mesures. Ces fichiers de géométrie voxélisée ont été directement utilisés pour le calcul de dose par MC.

3. Résultats et discussions

3.1. Comparaison entre les calculs MC effectués avec des images TDM et des fantômes numériques

3.1.1. Mode électron 9 MeV

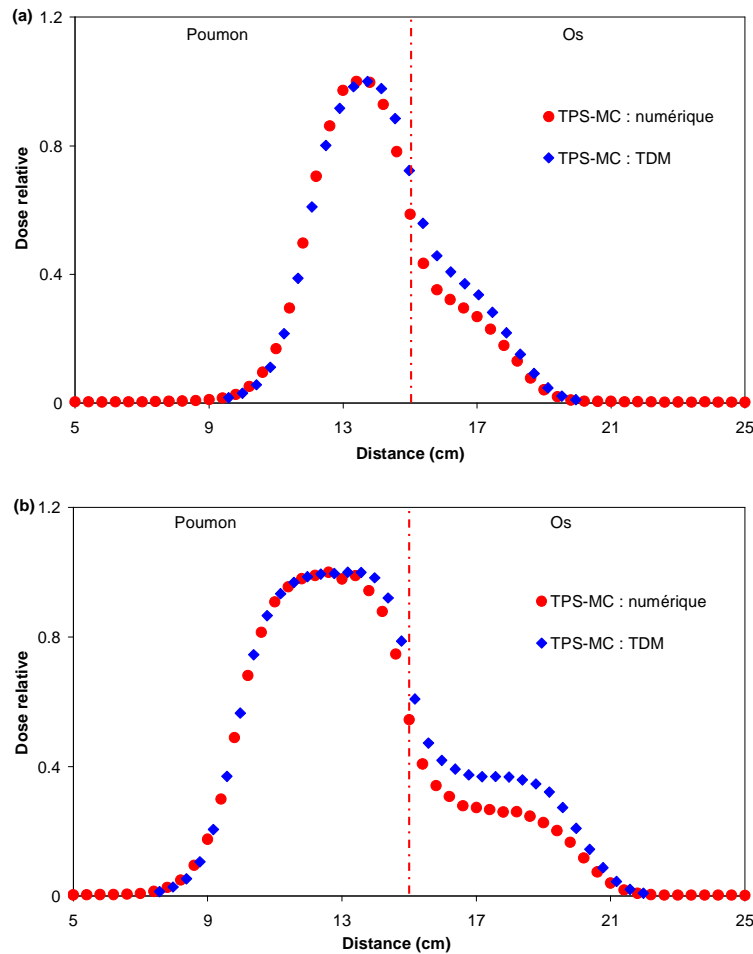


Figure 2 : Mode électron 9 MeV : Profils de dose à 3 cm de profondeur calculés par MC à partir du fantôme numérique et des images TDM. Cas du champ 6×6 cm² (a) et 10×10 cm² (b).

La Figure 2 illustre la comparaison entre les profils de dose calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et ceux calculés à partir du fantôme numérique. Les profils de dose pour les champs $6 \times 6 \text{ cm}^2$ et $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ont été obtenus à 3 cm de profondeur derrière les hétérogénéités équivalent-poumon et équivalent-os (Figure 1a).

Les calculs MC ont été effectués avec une taille de voxel de $4 \times 4 \times 2 \text{ mm}^3$. Les incertitudes statistiques (1σ) associées à différents points de calcul pour les deux champs sont regroupées dans le Tableau 2.

Tableau 2 : Incertitudes statistiques (1σ) associées aux calculs MC dans différentes positions du profil de dose pour les deux champs étudiés.

Distance (cm)	$6 \times 6 \text{ cm}^2$	$10 \times 10 \text{ cm}^2$
9,8	-	1,05 %
11,8	1,10 %	0,73 %
13	0,71 %	0,72 %
13,4	0,75 %	0,71 %
14,6	0,86 %	0,81 %
15,4	1,15 %	1,09 %
16,6	1,35 %	1,34 %
17,8	1,67 %	1,35 %
20,2	-	1,98 %

La Figure 2 montre des écarts non négligeables (jusqu'à 10 % d'écart) entre les deux calculs MC, en particulier à l'interface entre les deux hétérogénéités et derrière le matériau équivalent-os. Derrière le matériau équivalent-poumon, l'écart maximal entre les deux distributions est inférieur à 2 %.

Pour comprendre ces désaccords, nous avons examiné la nature du matériau et la masse volumique attribuées à chaque voxel suite à la conversion des UH. Les matrices de matériaux et de densités utilisées par le TPS-MC sont visualisées sur la Figure 3. Nous constatons les points suivants :

- Les masses volumiques obtenues par la conversion des UH diffèrent des valeurs réelles, en particulier pour le matériau équivalent-os. Pour ce matériau, la densité attribuée par le TPS-MC varie entre 1,2 et 1,9 g.cm^{-3} alors que la densité réelle est égale à 1,92 g.cm^{-3} .
- L'épaisseur de la plaque équivalent-os dans la géométrie voxélisée issue des images TDM varie de 1 à 2 cm (Figure 3a) alors que l'épaisseur réelle mesure 1 cm.

- Au voisinage de l'interface entre les deux hétérogénéités (distance latérale de 12,5 à 15 cm), une partie de la plaque équivalent-poumon est considérée comme de l'air dans la géométrie voxélisée issue des images TDM (Figure 3a).
- Dans la géométrie voxélisée issue des images TDM, on distingue au niveau des interfaces entre les différentes plaques équivalent-eau, des fines couches de densités inférieures à celle de l'eau (Figure 3b). Dans le fantôme numérique, ces interstices n'ont pas été modélisés.

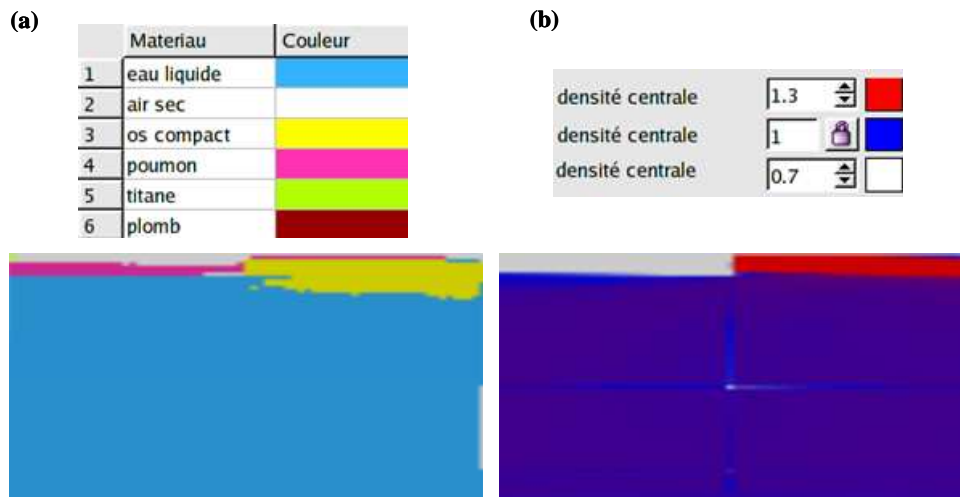


Figure 3 : Matrices de matériaux (a) et de masses volumiques (b) obtenues suite à la conversion des UH dans le TPS-MC ISOgray™.

La première origine de ces différences de matériaux et de densités observées est la présence d'artefacts dans les images TDM. Ces artefacts, dus à la présence de la plaque équivalent-os de forte densité, faussent les UH dans ce matériau et son voisinage. En conséquence, l'attribution des matériaux et masses volumiques qui dérivent des UH est aussi erronée.

Par ailleurs, la Figure 4 montre la courbe de correspondance $UH = f(\text{masse volumique})$ ainsi que les intervalles d'attribution des matériaux en fonction des UH utilisés dans le TPS-MC ISOgray™. Ces données sont définies à partir d'un fantôme contenant un certain nombre d'inserts de matériaux et masses volumiques connus. Elles transcrivent pour chaque voxel d'une image TDM d'un objet, le matériau et la masse volumique du voxel représentatif de cet objet. D'après les études menées dans ce domaine, il est difficile de définir des correspondances UH-matériau et UH-densité uniques. Ces données dépendent en effet de plusieurs paramètres tels que les conditions d'acquisition des images par le tomodensitomètre (diamètre du champ, tension, intensité et taille de la matrice d'acquisition) et des caractéristiques (en particulier, la composition des différents inserts) du fantôme utilisé pour

déterminer les correspondances UH-matériau et UH-densité (Constantinou *et al.* 1992, du Plessis *et al.* 1998, Schneider *et al.* 2000, Vanderstraeten *et al.* 2007, Isambert 2009). Ceci entraîne donc une imprécision sur la définition des matériaux et des densités dans la géométrie voxélisée.

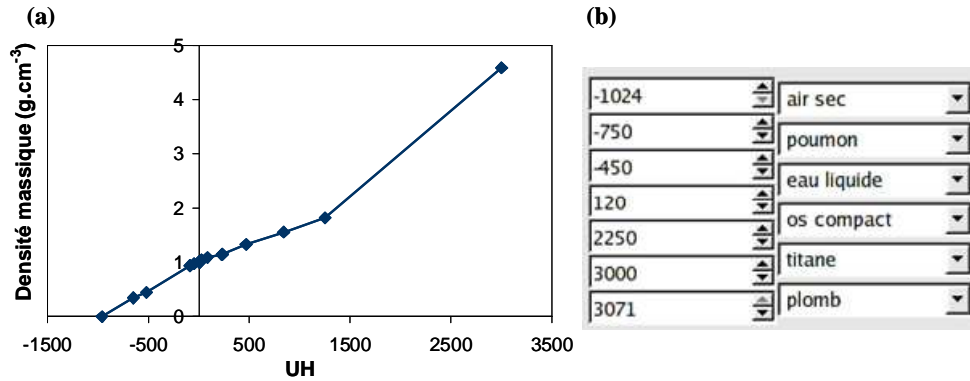


Figure 4 : Courbe de correspondance UH-masse volumique (a) et intervalles d'attribution des matériaux en fonction des UH (b) dans le TPS-MC ISOgray™.

3.1.2. Mode photon 25 MV

La comparaison entre les profils de dose calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et ceux calculés à partir du fantôme numérique est présentée sur la Figure 5. Les profils de dose pour les champs $4\times 4\text{ cm}^2$ et $10\times 10\text{ cm}^2$ ont été obtenus à 5 cm de profondeur derrière les hétérogénéités équivalent-poumon et équivalent-os (Figure 1b). Des voxels cubiques de 2 mm de côté ont été choisis pour les deux calculs dans le TPS-MC. Le Tableau 3 regroupe les incertitudes statistiques (1σ) associées aux différents points de calcul pour les deux champs étudiés.

L'analyse de la figure 5 met en évidence un bon accord entre les deux calculs MC. L'influence de la voxélisation de la géométrie sur les distributions de dose est donc moins importante en mode photon 25 MV qu'en mode électron 9 MeV. Une des raisons physiques possibles à cette moindre sensibilité est qu'en effet les électrons, vu leur faible parcours, déposent leur énergie dans un petit volume alors que les photons du fait de leur mode d'interaction déposent leur énergie dans un plus grand volume.

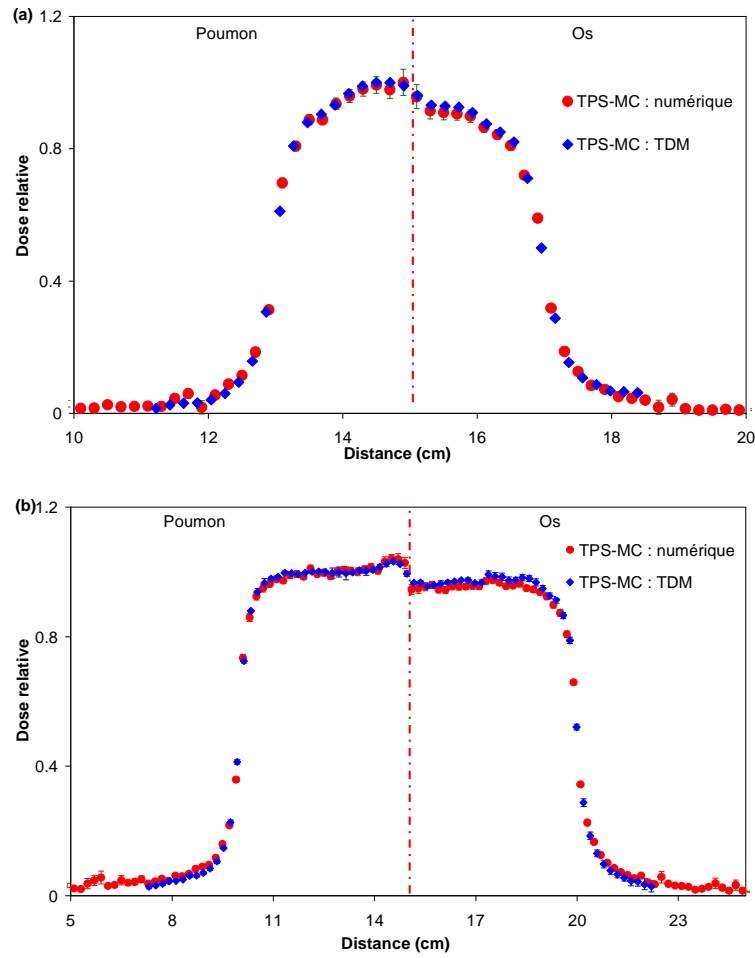


Figure 5 : Mode photon 25 MV : Profils de dose à 5 cm de profondeur calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et le fantôme numérique. Cas du champ 4×4 cm² (a) et 10×10 cm² (b).

Tableau 3 : Incertitudes statistiques (1σ) associées aux calculs MC dans différentes positions du profil de dose pour les deux champs étudiés.

Distance (cm)	4×4 cm ²	10×10 cm ²
9,8	-	2,1 %
11,8	-	1,0 %
13	2,1 %	1,2 %
13,4	1,4 %	1,1 %
14,6	1,6 %	1,4 %
15,4	1,7 %	1,4 %
16,6	1,8 %	1,0 %
17,8	-	0,9 %
20,2	-	1,8 %

3.2. Comparaison entre les mesures et les calculs MC

3.2.1. Mode électron 9 MeV

La Figure 6 illustre la comparaison entre les profils de dose (à 3 cm de profondeur) mesurés par film radiographique et ceux calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et le fantôme numérique.

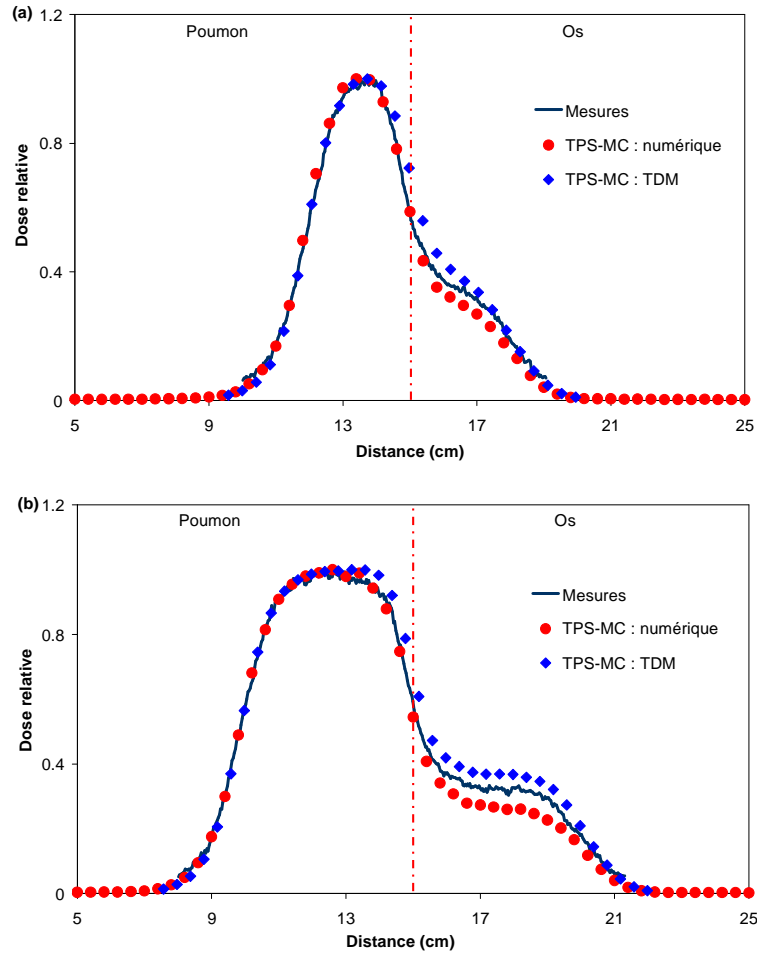


Figure 6 : Mode électron 9 MeV : Profils de dose à 3 cm de profondeur mesurés et calculés par MC à partir des images TDM et à partir du fantôme numérique. Cas du champ 6×6 cm² (a) et 10×10 cm² (b).

Le test de l'index gamma a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose mesurées et calculées. Dans le contexte d'une validation expérimentale du TPS-MC, les valeurs des critères d'acceptabilité ΔD_{max} et DTA retenues ont été restreintes à 2 % et 2 mm respectivement. Les mêmes critères ont été utilisés pour évaluer les différentes régions du profil de dose (intérieur du faisceau, pénombre et extérieur du faisceau). Il est à noter que la valeur du critère d'acceptabilité sur la dose (ΔD_{max}) est compatible avec les incertitudes

associées aux mesures (de l'ordre de 1,5 % à 1σ). La Figure 7 présente les résultats du test de l'index gamma pour les mesures par film et les calculs par MC (avec images TDM et fantôme numérique) dans les deux tailles de champ étudiées (6×6 et 10×10 cm²).

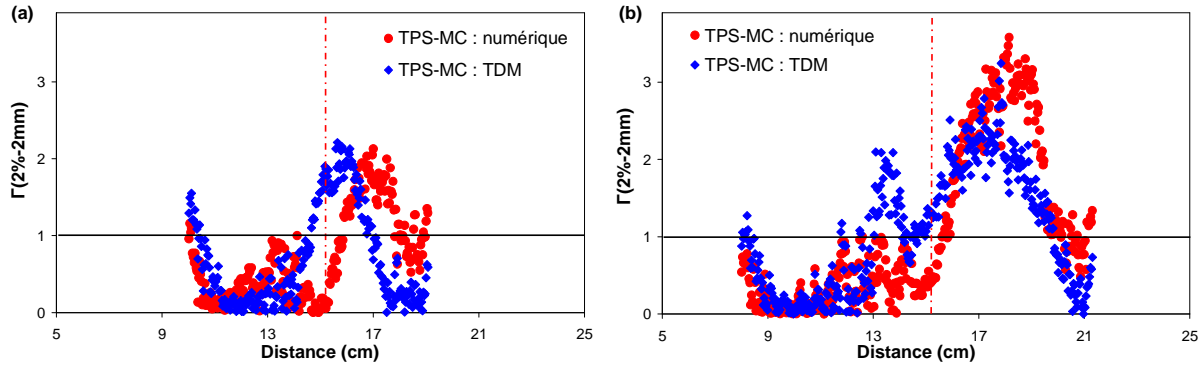


Figure 7 : Mode électron 9 MeV : Résultats du test de l'index gamma (2 % - 2 mm) pour les deux calculs MC à partir des images TDM et à partir du fantôme numérique. Cas du champ 6×6 cm² (a) et 10×10 cm² (b).

L'examen des deux figures 6 et 7 met en évidence les points suivants :

- Des écarts supérieurs à 2 % et 2 mm sont observés entre les mesures expérimentales (par film radiographique) et les résultats des deux calculs par MC, en particulier derrière le matériau équivalent-os. Au voisinage de l'interface entre les deux matériaux, le résultat du test de l'index gamma est accepté pour la simulation avec le fantôme numérique mais rejeté pour le calcul avec les images TDM. Derrière le matériau équivalent-poumon, un bon accord (écarts inférieurs à 2 % et 2 mm) est en général observé entre les différentes distributions, sauf pour le calcul avec les images TDM dans le cas du champ 10×10 cm², où le résultat du test de l'index gamma est rejeté pour les distances latérales de 12,8 à 15 cm (Figure 7b).
- Le résultat du test de l'index gamma est rejeté pour les points du profil situés en dehors du champ. Ce rejet n'est toutefois pas « rédhibitoire » étant donné que les critères d'acceptabilité dans ces zones sont généralement beaucoup plus élevés que 2 % et 2 mm (cf. Chapitre I, Paragraphe 6.3).

En plus des erreurs liées à la conversion de l'image TDM en géométrie voxélisée, les écarts observés entre les mesures expérimentales et les calculs MC (avec images TDM et fantôme numérique), en particulier derrière la plaque équivalent-os, peuvent être dus à la perturbation de la mesure par la présence du film radiographique. Dans le but de clarifier le comportement dosimétrique du film au cours de la mesure dans le fantôme hétérogène, nous avons effectué

un calcul de dose en incluant le film radiographique dans la géométrie modélisée. Ceci était possible avec le code MC de référence PENELOPE.

3.2.1.1. Simulation du film radiographique avec le code MC PENELOPE

Pour le calcul des profils de dose, les fantômes hétérogènes avec le film radiographique inséré dans sa pochette en papier aux positions indiquées précédemment, ont été modélisés avec le programme PENGEO (Annexe A) en respectant les caractéristiques physiques et géométriques des fantômes. La Figure 8 montre une vue en deux dimensions de la modélisation géométrique des fantômes hétérogènes avec les films.

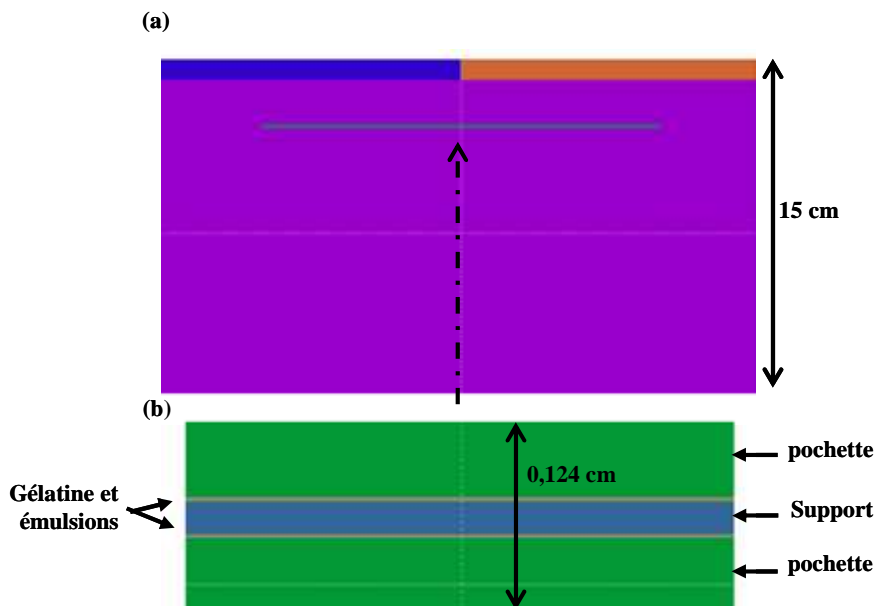


Figure 8 : (a) Visualisation avec le logiciel GVIEW2D de la géométrie modélisée du fantôme hétérogène avec le film. (b) Agrandissement de la géométrie modélisée du film radiographique.

Le film radiographique est composé d'un support en polyester de 180 μm d'épaisseur. Ce support est recouvert d'une mince couche d'adhésif fixant, sur ses deux faces, une émulsion (20 μm d'épaisseur) contenant des microcristaux de bromure d'argent enrobés dans de la gélatine. Ces émulsions, sensibles aux photons lumineux, sont recouvertes par une surcouche protectrice. Le tout est contenu dans une pochette en papier étanche à la lumière.

Les paramètres de simulation choisis pour le calcul de dose avec le code PENELOPE sont regroupés dans le Tableau 4.

Tableau 4 : Paramètres de simulation MC PENELOPE dans le cas du mode électron 9 MeV.

Paramètres	Electron (9 MeV)
$C1 = C2$	0,05
$W_{cc} \text{ (keV)} = W_{cr} \text{ (keV)}$	10*
Energies de coupure : e^- , photons, e^+ (keV)	10**, 10**, 10**

* Les valeurs dans l'émulsion du film sont $W_{cc} = W_{cr} = 5 \text{ keV}$.

** Les énergies de coupures dans l'émulsion sont de 5 keV pour les électrons et les positons et de 1 keV pour les photons. Ce choix est compatible avec l'épaisseur minimale du volume de détection ($4 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 20 \text{ }\mu\text{m}$), la portée d'un électron de 5 keV étant de $0,35 \text{ }\mu\text{m}$ dans l'émulsion.

La Figure 9 illustre la comparaison entre les profils de dose mesurés et calculés par le code PENELOPE en modélisant le film dans le fantôme hétérogène. Les profils de dose calculés dans le TPS-MC en utilisant le fantôme numérique ainsi que ceux calculés avec le code PENELOPE sans modéliser le film sont également présentés sur cette figure. L'analyse de la figure 9 montre que :

- Un bon accord est mis en évidence entre les résultats du code PENELOPE avec modélisation du film et ceux mesurés expérimentalement (écarts inférieurs à 2 % et 2 mm). Les écarts maximaux correspondent aux points du profil situés au voisinage de l'interface entre les deux matériaux différents. Ceci peut être dû à la perturbation de la couche d'air inter-plaques présente durant les mesures. Ces interstices n'ont pas été modélisés dans PENELOPE.
- Les résultats du TPS-MC calculés avec le fantôme numérique correspondent à ceux obtenus avec le code PENELOPE sans modélisation du film. Ce bon accord confirme les résultats de l'étude menée au Chapitre IV sur la validation du code PENFAST par rapport au code PENELOPE).

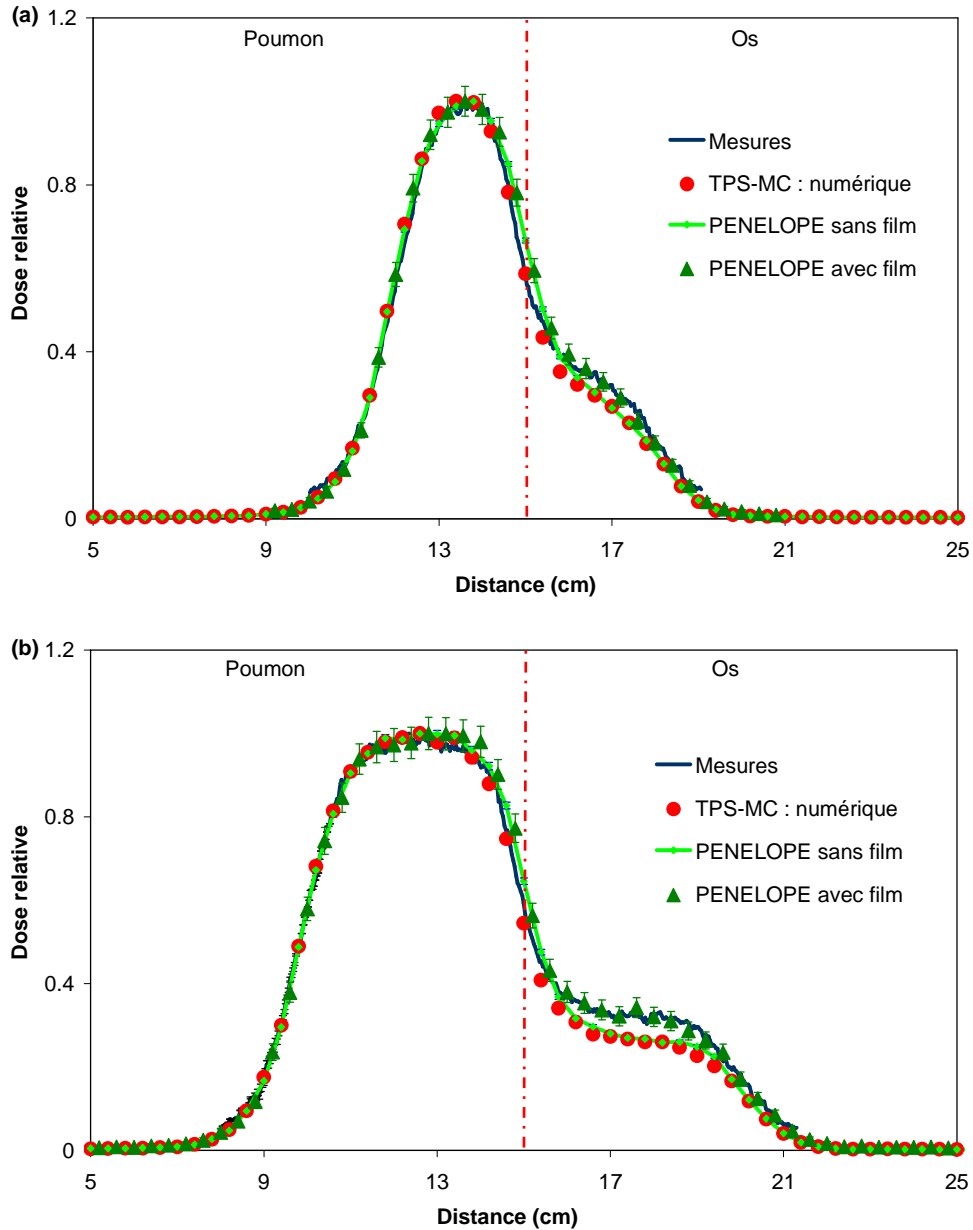


Figure 9 : Mode électron 9 MeV : Profils de dose à 3 cm de profondeur mesurés et calculés par PENELOPE avec et sans modélisation du film ainsi que par le TPS-MC en utilisant le fantôme numérique. Cas du champ $6 \times 6 \text{ cm}^2$ (a) et $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (b).

La bonne concordance entre la simulation MC du film radiographique et la mesure réalisée avec celui-ci derrière le matériau équivalent-os confirme la perturbation de la mesure par la présence du film. Sa présence entraîne en effet, de par sa composition, une perturbation de la fluence observée en interagissant comme milieu supplémentaire au sein du fantôme étudié.

Par ailleurs, l'étalonnage du film radiographique est généralement réalisé dans un milieu homogène (eau) pour lequel cet instrument de mesure possède une réponse linéaire avec la dose reçue et faiblement dépendante de l'énergie du faisceau. Dans un milieu hétérogène, les

films ont en revanche une forte dépendance vis-à-vis des photons de basse énergie notamment en présence de matériaux de forte densité. Le film tend alors à surestimer la dose dès lors que le milieu traversé est dense à cause de sa sensibilité aux rayonnements de basse énergie produits par diffusion dans ces matériaux. Pour ces raisons, le film radiographique semble donc être inadapté à la dosimétrie dans un milieu hétérogène composé de matériaux de forte densité. Cette conclusion a été déjà confirmée par plusieurs études antérieures comme celles menées par Mayer *et al.* (1997), Suchowerska *et al.* (1999), Esthappan *et al.* (2002), Martens *et al.* (2002a), Charland *et al.* (2003) et Serrano (2006). Celles-ci ont montré que dans un milieu hétérogène les films ont une sur-réponse aux photons de basse énergie notamment pour des énergies inférieures à 400 keV.

Le bon accord entre les résultats du TPS-MC avec fantômes numériques et le code PENELOPE sans modélisation du film montre la capacité du TPS-MC à calculer une dose précise dès lors que les matériaux sont correctement définis. Il s'agit de la dose réellement absorbée dans le milieu sans perturbation du détecteur.

3.2.2. Mode photon 25 MV

La comparaison entre les profils de dose (à 5 cm de profondeur) mesurés par le film radiographique et ceux calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et le fantôme numérique ainsi que ceux calculés par le code PENELOPE en modélisant le film, est présentée sur la Figure 10. Le tableau 5 regroupe les paramètres de simulation PENELOPE.

Comme pour le mode électron 9 MeV, le test de l'index gamma a été utilisé pour évaluer l'écart entre les distributions de dose mesurées et calculées. Les résultats du test de l'index gamma pour les deux calculs dans le TPS-MC (avec images TDM et fantôme numérique) sont représentés sur la Figure 11 pour les deux tailles de champ étudiées. Ce test n'a malheureusement pas pu être utilisé pour évaluer les calculs avec PENELOPE puisque l'incertitude statistique associée à ces calculs (supérieure à 2 % à 1σ) est plus élevée que les critères d'acceptabilité retenus.

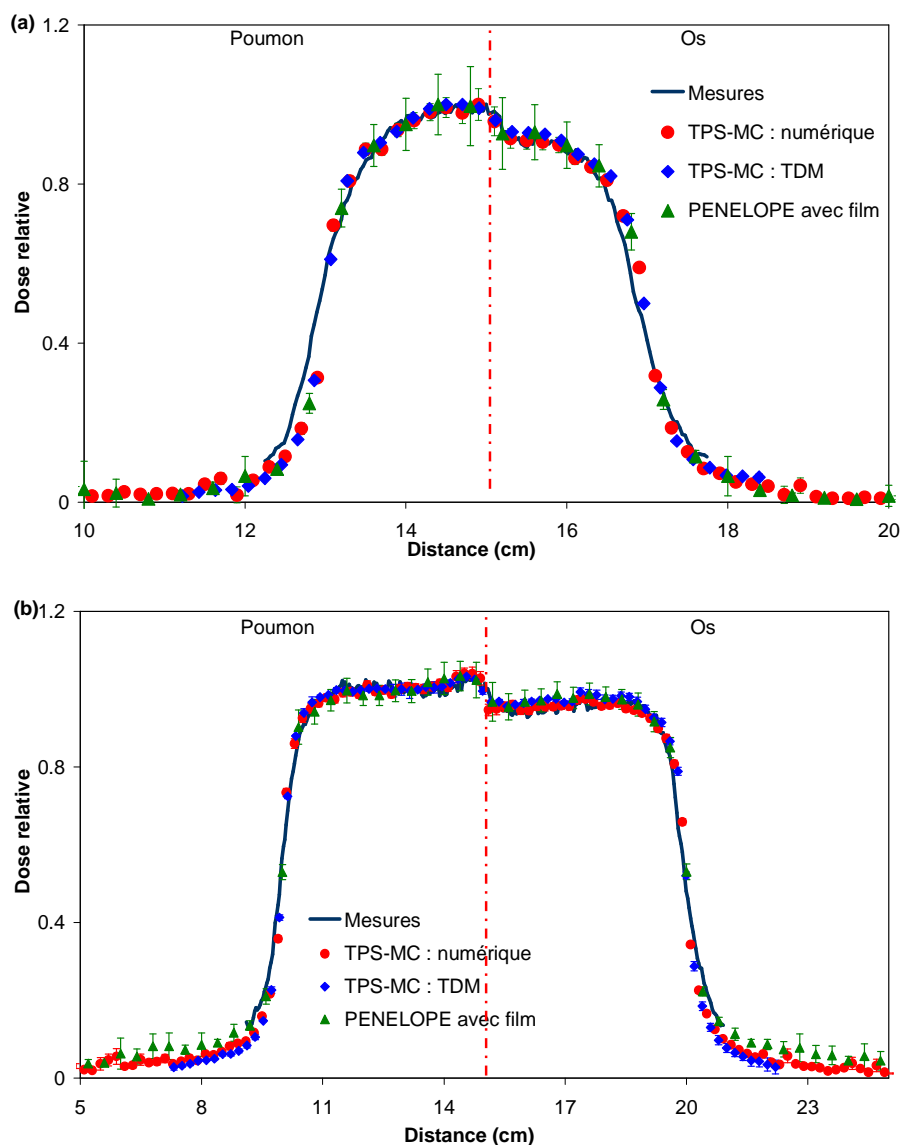


Figure 10 : Mode photon 25 MV : Profils de dose à 5 cm de profondeur mesurés et calculés dans le TPS-MC en utilisant les images TDM et le fantôme numérique ainsi que ceux calculés par le code PENELOPE en modélisant le film. Cas du champ $4 \times 4 \text{ cm}^2$ (a) et $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (b).

Tableau 5 : Paramètres de simulation MC PENELOPE dans le cas du mode photon 25 MV.

Paramètres	
C1 = C2	0,05
Wcc (keV) = Wcr (keV)	10*
Energies de coupure : e^- , photons, e^+ (keV)	100**, 10**, 100**
Techniques de réduction de variance***	NSPLIT = 25

* Les valeurs dans l'émulsion du film sont $W_{cc} = W_{cr} = 5 \text{ keV}$.

** Les énergies de coupures dans l'émulsion sont de 5 keV pour les électrons et les positons et de 1 keV pour les photons. Ce choix est compatible avec l'épaisseur minimale du volume de détection ($4 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 20 \text{ }\mu\text{m}$), la portée d'un électron de 5 keV étant de $0,35 \text{ }\mu\text{m}$ dans l'émulsion.

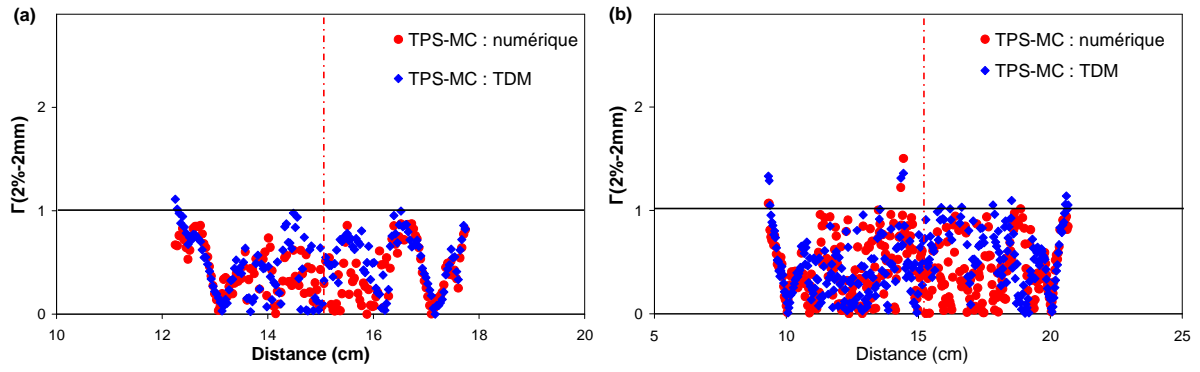


Figure 11 : Mode photon 25 MV : Résultats du test de l'index gamma (2%-2mm) pour les calculs dans le TPS-MC à partir des images TDM et à partir du fantôme numérique. Cas du champ 4×4 cm² (a) et 10×10 cm² (b).

Malgré l'incertitude statistique élevée sur le calcul PENELOPE, l'analyse des deux figures 10 et 11 met en évidence que les trois méthodes de calcul de dose par MC donnent des résultats très proches. En outre, un bon accord est généralement observé entre les mesures par film et les trois calculs par MC. Les écarts sont en général inférieurs à 2 % et 2 mm. Toutefois, il est important de préciser que le résultat du test de l'index gamma a été rejeté, dans le cas du champ 10×10 cm², pour quelques points du profil derrière le matériau équivalent-poumon à une distance proche de 14,4 cm (Figure 11b). Ceci peut être dû aux fluctuations non négligeables observées dans cette zone du profil de dose mesuré.

4. Evaluation de l'intérêt de l'ajout de nouveaux matériaux dans le TPS-MC

Comme déjà évoqué dans le Chapitre I, Paragraphe 5.2.2, le calcul prévisionnel de dose dans le patient à l'aide du TPS-MC utilise en entrée les images TDM. Les UH, de chaque pixel de l'image sont représentées à l'aide d'une échelle de gris, codée en 12 bits, avec des valeurs comprises entre -1024 et 3071. Pour les images TDM d'un corps humain, l'air est représenté par une valeur d'UH aux alentours de -1000, l'eau par une valeur d'UH aux alentours de 0 et l'os par une valeur d'UH supérieure à 500.

Même si les calculs de dose réalisés à l'aide de la méthode MC sont effectués en simulant directement les interactions entre le faisceau de photons ou d'électrons et les tissus, la composition atomique et la masse volumique de ces tissus sont nécessaires pour le calcul des sections efficaces (du Plessis *et al.* 1998, Schneider *et al.* 2000, Vanderstraeten *et al.* 2007, Salvat *et al.* en prep., Isambert 2009). La conversion correcte du niveau de gris de chaque pixel des images TDM en données de simulation est une des étapes qui détermine la justesse des calculs MC.

Il est à rappeler que la version standard du code MC (PENFAST) implémentée dans le TPS ISOgray™ n'inclut que quatre matériaux d'intérêt clinique, à savoir : l'eau, l'os compact, le poumon et l'air. Dans une étude précédente (cf. Chapitre IV, Paragraphe 3.1), nous avons démontré que l'introduction du matériau PMMA dans la base de données du code PENFAST était indispensable pour améliorer la précision sur la dose calculée dans ce matériau.

Dans cette partie, l'intérêt clinique d'ajouter de nouveaux matériaux (tissu adipeux, cartilage, etc.) dans le TPS-MC a été évalué en mesurant l'effet sur la dose des imprécisions de la conversion des données TDM en données utilisables par le TPS-MC. Ces imprécisions surviennent notamment lorsqu'un matériau est différent de ceux de la base de données du TPS-MC. De ce fait, les distributions de dose calculées avec le TPS-MC ont été comparées à celles calculées avec le code de référence PENELOPE dans des fantômes hétérogènes contenant des plaques de tissu adipeux et de cartilage. Les distributions de dose obtenues avec le faisceau de photons de 25 MV et le faisceau d'électrons de 9 MeV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$, de l'accélérateur Primus ont été étudiées.

La configuration des fantômes hétérogènes étudiés est représentée sur la Figure 12. La composition et la masse volumique des matériaux utilisés dans ces fantômes sont données dans le Tableau 6.

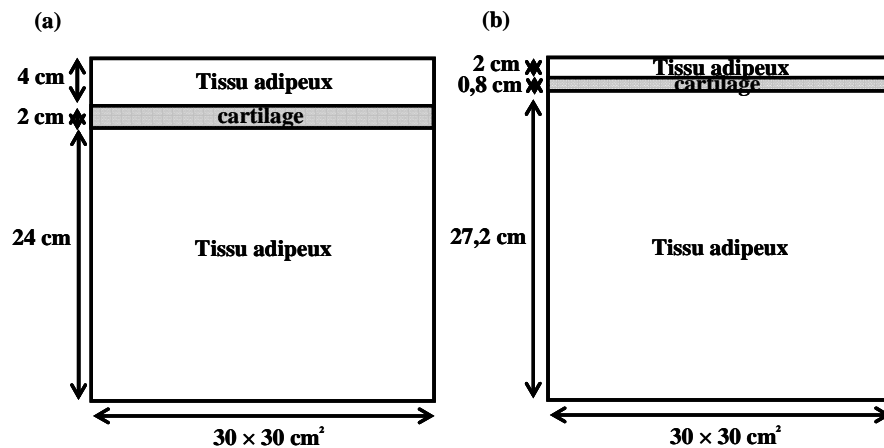


Figure 12 : Fantômes hétérogènes composés de plaques de tissu adipeux et de cartilage, pour le mode photon (a) et le mode électron (b).

Tableau 6 : Composition et densité des matériaux utilisés dans les fantômes hétérogènes.

Matériau	Masse volumique (g.cm ⁻³)	Composition (% massique)
Tissu adipeux	0,92	C(63,76) ; O(23,27) ; H(11,87) ; N(0,80) ; Cl(0,12) S(0,07) ; Na(0,05) ; K(0,04) ; P(0,02)
cartilage	1,1	O(74,46) ; C(9,90) ; H(9,53) ; N(2,20) P(2,20) ; S(0,90) ; Na(0,50) ; Cl(0,31)

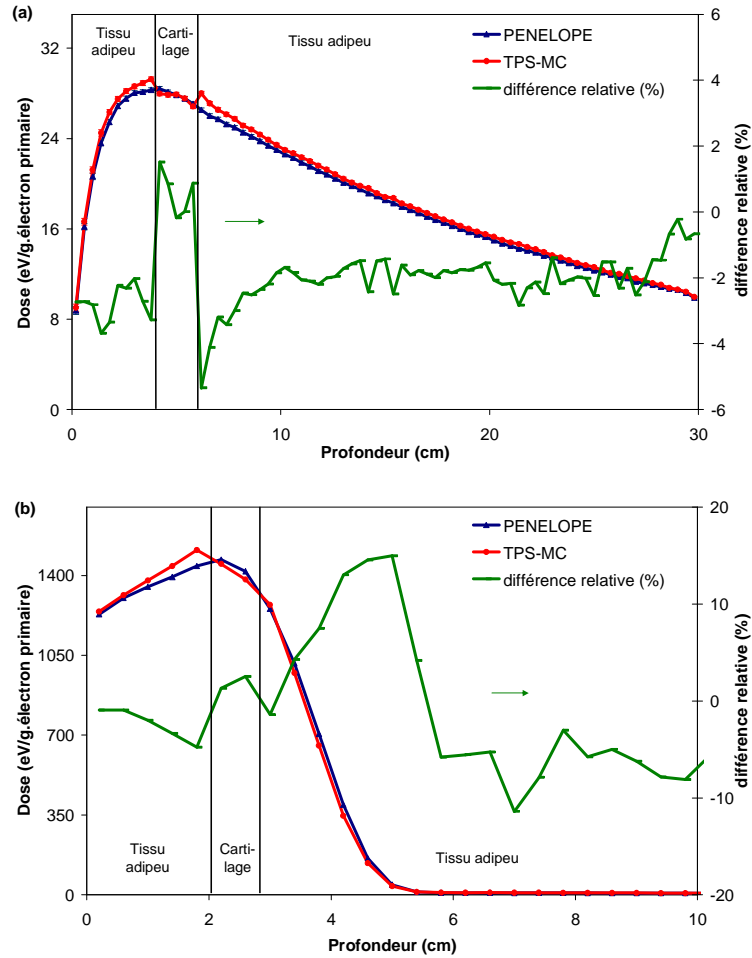


Figure 13 : Comparaison des rendements en profondeur calculés avec PENELOPE et le TPS-MC dans le fantôme hétérogène en mode photon (a) et en mode électron (b). La différence relative entre les deux distributions est représentée sur l'axe des ordonnées de droite.

Pour les calculs de dose avec PENELOPE, le fantôme hétérogène a été modélisé avec le programme de géométrie PENGEO (Annexe A) en respectant la composition atomique et la masse volumique des différents matériaux.

Pour les calculs de dose avec le TPS-MC, les fantômes voxélisés ont été générés numériquement en attribuant la masse volumique correcte à chaque voxel. Toutefois, pour l'attribution des matériaux, les plaques de tissu adipeux et de cartilage ont été respectivement

définies par de l'eau et de l'os compact disponibles dans la base de données du TPS-MC. Cette attribution correspond à ce qui serait fait dans le cas d'un calcul réel avec le TPS-MC (Isambert 2009).

Des voxels cubiques de 4 mm de côté ont été utilisés dans les deux cas de simulation.

La Figure 13 compare les rendements en profondeur calculés avec PENELOPE et le TPS-MC dans les fantômes hétérogènes. Des différences relatives non négligeables, allant jusqu'à 5,3 % pour le mode photon et jusqu'à 15 % pour le mode électron, ont été observées dans le cartilage et le tissu adipeux, en particulier au voisinage des interfaces entre les deux matériaux. En effet, dans le TPS-MC, les distributions de diffusion multiple (distributions angulaires et de perte d'énergie) utilisées pour le tissu adipeux et le cartilage sont celles définies pour l'eau et l'os compact respectivement. La molécule du tissu adipeux contient 64 % de carbone alors que l'eau n'en contient pas. De même, le cartilage ne contient pas de calcium alors que la molécule d'os compact en contient 22 % ; ces deux matériaux contiennent aussi des teneurs différentes en hydrogène et en phosphore. Ces différences en composition entraînent des différences en section efficace des interactions des photons et des électrons dans le matériau, comme il a été démontré dans le Chapitre IV, Paragraphe 3.1. Les effets dosimétriques des électrons rétrodiffusés aux interfaces entre les différents matériaux sont donc différents entre les diverses compositions.

Tous ces résultats montrent, mais on s'y attendait, qu'il est illusoire d'espérer obtenir des résultats corrects avec des matériaux qui ne sont pas les bons. Ainsi, il est particulièrement important de pouvoir distinguer les différentes compositions d'os (cartilage, os spongieux, etc.) et de matériaux équivalent-tissu (tissu adipeux, muscle, peau, etc.) afin d'effectuer un calcul précis de dose par MC dans le patient.

Ces résultats rejoignent ceux de différentes études menées sur ce sujet (du Plessis *et al.* 1998, Schneider *et al.* 2000, Vanderstraeten *et al.* 2007, Isambert 2009). Toutes ces études ont démontré l'importance de l'utilisation de plusieurs compositions d'os pour le calcul de dose par MC. Parmi elles, une étude récente de Vanderstraeten *et al.* (2007) a montré que l'utilisation d'un seul type d'os donne des différences allant jusqu'à 10 % (pour un faisceau de photons de 6 MV) par rapport à l'utilisation d'un assemblage de dix types d'os différents.

Dans le cadre du projet MAESTRO, Isambert (2009) a confirmé que l'utilisation d'un seul type d'os n'est pas suffisante pour une conversion précise des images TDM en géométrie voxélisée, en particulier dans le cas des images de la tête et du cou.

5. Conclusions

L'étude des distributions de dose dans un fantôme hétérogène, effectuée avec le TPS-MC ISOgray™ en conditions cliniques, a mis en évidence les constatations suivantes :

- La capacité du TPS-MC à calculer une dose précise dès lors que les caractéristiques physiques et géométriques des éléments étudiés sont correctes et que la perturbation de l'instrument de mesure est prise en compte.
- L'imprécision du TPS dans l'attribution des matériaux et des masses volumiques à la géométrie voxelisée utilisée pour le calcul de dose par MC. Cette imprécision est principalement due à la présence d'artefacts dans l'image TDM, en particulier en présence de matériaux de masse volumique élevée. Il est donc nécessaire d'introduire dans le TPS un algorithme de correction automatique des artefacts. On ajoute à cela la problématique de la dépendance des données de correspondance UH-matériau et UH-densité aux conditions d'acquisition de l'image et au fantôme utilisé. De plus, cette imprécision peut être liée à l'insuffisance du nombre de matériaux définis dans le code PENFAST, notamment lorsqu'un matériau est différent de ceux de la base de données du code. D'où la nécessité de dissocier plusieurs compositions d'os (cartilage, os compact, etc.) et de matériaux équivalent-tissu (tissu adipeux, muscle, peau, etc.) pour améliorer la précision sur la dose calculée dans ces matériaux.
- La mauvaise réponse du film radiographique en milieu hétérogène. Son emploi avec des fantômes hétérogènes n'est pas conseillé puisqu'il perturbe la dose par sa présence dans le milieu et qu'il présente une grande sensibilité aux photons de basse énergie diffusés par les milieux denses. L'utilisation d'autres types de dosimètres qui perturbent moins le champ de rayonnement est plus adaptée, comme par exemple les dosimètres équivalents-tissus (dosimètres thermoluminescents, etc.).

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Les TPS qui utilisent des méthodes numériques classiques sont rapides, mais peu précis, notamment lorsque la tumeur est située dans des zones proches d'hétérogénéités comme le poumon ou l'os. La méthode MC permet une estimation de la dose très proche de la réalité en répondant au critère de précision exigé (3 % sur la dose délivrée). Cependant, depuis plusieurs années, le recours à cette méthode dans les TPS se heurte à une impossibilité liée au temps de calcul nécessaire pour obtenir une incertitude statistique acceptable. Or ce recours devient inévitable si l'on veut aborder des configurations complexes inhérentes aux nouvelles techniques de radiothérapie comme par exemple la RCMI.

Pour répondre à cet enjeu, des avancées considérables relatives à la rapidité du calcul MC ont été apportées dans le cadre du projet européen MAESTRO avec le développement du nouveau code PENFAST ainsi que dans le cadre du projet TELEDOS avec la parallélisation de ce code. PENFAST permet une simulation rapide de la dose déposée par des photons, électrons et positons dans des géométries voxélisées (issues des images TDM) à partir de PSF pré-calculés avec le code MC généraliste PENELOPE. PENFAST est fondé sur les mêmes modèles d'interactions physiques que ceux utilisés dans PENELOPE, mais il met en œuvre de nouveaux algorithmes de transport des électrons et positons afin de réduire le temps de la simulation.

Dans ce contexte, ce travail de thèse, issu de ces deux projets, consiste à évaluer d'une part les performances techniques (temps de calcul) et d'autre part les performances dosimétriques (précision) du code MC rapide PENFAST en vue de son utilisation en routine clinique comme outil de calcul de dose performant au service d'une radiothérapie de qualité.

La première partie de ce travail a été consacrée à la validation des différentes améliorations apportées aux deux codes MC PENELOPE et PENFAST afin d'accélérer le calcul et à leur optimisation afin d'obtenir la meilleure performance en terme de gain en temps de calcul.

Tout d'abord, la parallélisation des deux codes, en utilisant l'interface MPI et un générateur parallèle de nombres pseudo-aléatoires, a été validée. Des comparaisons entre les résultats des codes parallélisés et ceux des codes standards (non parallélisés) ont été effectuées dans le cas de l'accélérateur linéaire Saturne 43. Les résultats ont montré un très bon accord entre les

versions parallélisées et non parallélisées et valident ainsi la parallélisation de PENELOPE et de PENFAST. En outre, des tests de scalabilité ont été effectués pour évaluer les performances en terme de gain en temps de calcul. Les résultats ont démontré que le gain en temps de calcul augmente quasi-linéairement avec le nombre de processeurs utilisés. Cette étude des codes parallélisés a montré la simplicité de mise en œuvre des différentes fonctionnalités ainsi que la possibilité de l'obtention des performances attendues.

Par la suite, les techniques de réduction de variance proposées dans le code PENELOPE (« splitting » du rayonnement de freinage, « splitting » et roulette russe angulaires ainsi que « splitting » circulaire) ont été optimisées afin d'obtenir la meilleure efficacité de simulation. Cette étude a mis en évidence un gain d'un facteur minimal de 500 sur le temps de calcul du PSF. Ces techniques ont été ensuite validées en vérifiant qu'elles n'introduisaient aucun biais dans les résultats obtenus. Les spectres en énergie des particules à la sortie de la tête d'irradiation et les distributions de dose calculés avec les techniques de réduction de variance ont été comparés à ceux d'une simulation analogue, dans le cas du faisceau de photons de 12 MV de l'accélérateur Saturne 43. Le bon accord trouvé a confirmé que ces techniques ne biaisent pas les résultats.

A l'issue de cette partie, la démonstration de l'utilisation des méthodes MC en clinique, grâce à une réduction du temps de calcul, a été faite. Cette étude a permis de mettre en évidence les performances techniques des codes MC PENELOPE et PENFAST, moyennant l'utilisation des techniques de réduction de variance et leur parallélisation.

Dans la deuxième partie de ce travail, une nouvelle méthode d'ajustement du spectre en énergie des électrons primaires à la sortie de la section de déviation magnétique d'un accélérateur linéaire a été présentée et testée. En effet, une étape indispensable au calcul de dose avec le code MC PENFAST concerne la détermination des caractéristiques du faisceau d'électrons primaires (distributions énergétique, spatiale et angulaire de ces électrons), caractéristiques qui sont relativement mal connues et difficilement mesurables. Les études antérieures sur la sensibilité des résultats de la simulation MC aux caractéristiques du faisceau initial ont montré que sa divergence angulaire avait une influence négligeable sur les distributions de dose. De plus, nous avons démontré, pour les faisceaux étudiés, une influence très faible de la taille de la source d'électrons primaires sur les profils de dose. En conséquence, la caractéristique principale du faisceau d'électrons primaires à ajuster reste son énergie (c'est-à-dire sa distribution énergétique) puisqu'elle affecte directement la qualité du faisceau.

La méthode présentée repose, tout d'abord, sur plusieurs simulations du rendement en profondeur dans l'eau réalisées avec le code MC de référence PENELOPE en considérant différents faisceaux d'électrons primaires monoénergétiques. Ensuite, le principe des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité est utilisé pour obtenir une représentation discrète du spectre énergétique des électrons primaires qui permette d'obtenir un rendement en profondeur se conformant au mieux aux mesures expérimentales. Le premier avantage de cette méthode, par rapport aux méthodes empiriques généralement utilisées, est sa simplicité de mise en œuvre ainsi que sa rapidité. Elle ne distingue qu'un seul degré de liberté qui prend en compte l'énergie moyenne par le biais de la distribution en énergie qui inclue l'asymétrie du spectre. Son deuxième avantage est qu'elle permet de déterminer la « meilleure » distribution en énergie au sens des moindres carrés.

Pour valider cette méthode, des simulations avec les deux accélérateurs Saturne 43 et Primus recouvrant les modes photon et électron selon diverses énergies et tailles de champs ont été réalisées. Les résultats du test de l'index gamma, utilisé pour évaluer la concordance entre les simulations et les mesures dans une cuve à eau, ont permis de valider cette méthode pour les deux modes et tous les champs étudiés en montrant ainsi sa robustesse.

A l'issue de cette partie, les PSF créés à l'entrée des fantômes ont été utilisés comme données d'entrée pour le calcul des distributions de dose au sein des fantômes homogène et hétérogènes en vue de la validation dosimétrique du code PENFAST.

Dans une troisième partie, une évaluation de la physique du code MC rapide PENFAST a été effectuée. Cette étude a été réalisée sur des fantômes numériques définis en utilisant les caractéristiques physiques et géométriques exactes des matériaux. Les images TDM des fantômes n'ont pas été utilisées pour s'affranchir de l'incertitude sur la conversion des UH en données de simulation et de ce fait, valider le modèle physique du code. Cette validation a été menée, en conditions métrologiques, pour un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV issus de l'accélérateur Saturne 43 installé au LNH. Les distributions de dose calculées avec PENFAST en milieux homogène et hétérogènes (os, poumon) ont été comparées à celles calculées avec le code MC généraliste PENELOPE ainsi qu'aux mesures expérimentales (ionométriques et chimiques). Cette étude a nécessité l'introduction d'un nouveau matériau dans la base de données du code PENFAST. En effet, pour utiliser de façon optimale les capacités du code MC, une description la plus précise possible de la composition atomique et de la masse volumique des matériaux constituant la géométrie est requise.

Le bon accord entre les différents résultats a permis une validation des modèles physiques inclus dans le code PENFAST pour les configurations étudiées. Cette étude a montré que, pour des faisceaux de photons et d'électrons, PENFAST fournit des résultats qui sont équivalents, en termes de précision, à ceux obtenus à l'aide de PENELOPE. Selon la qualité du faisceau et la géométrie modélisée, le code PENFAST est 9 à 20 fois plus rapide que le code PENELOPE. En outre, le bon accord entre les simulations PENFAST et les mesures expérimentales en milieux homogène et hétérogènes a montré la capacité du code PENFAST à reproduire les phénomènes physiques en modes photon et électron et à calculer une dose précise même en condition de manque d'équilibre électronique.

Bien que le code MC PENFAST soit validé pour des conditions métrologiques sur des fantômes numériques de caractéristiques réelles, le calcul de dose dans le TPS ISOgray™ fondé sur le code MC PENFAST doit être évalué en conditions cliniques standards d'irradiation sur des images TDM avant toute utilisation en routine clinique. La conversion des UH en données de simulation (matériau et masse volumique requis pour chaque voxel) peut être ainsi évaluée.

Cette étude a fait l'objet de la dernière partie de ce travail. Elle a été menée pour le mode photon 25 MV et le mode électron 9 MeV issus de l'accélérateur Primus installé au CAL. En plus du champ de référence $10 \times 10 \text{ cm}^2$, les petits champs $4 \times 4 \text{ cm}^2$ et $6 \times 6 \text{ cm}^2$ pour le mode photon et le mode électron ont été respectivement étudiés. L'étude en milieu hétérogène (os, poumon) a été réalisée par comparaison des distributions de dose obtenues dans le TPS-MC à partir des images TDM avec celles calculées à partir des fantômes numériques ainsi qu'avec celles mesurées par des films radiographiques.

Les résultats ont montré la capacité du TPS-MC à calculer une dose précise dès lors que les caractéristiques physiques et géométriques des éléments étudiés sont correctes et que la perturbation de l'instrument de mesure est prise en compte. Cette étude a toutefois révélé une imprécision du TPS dans l'attribution des matériaux et des masses volumiques à la géométrie voxelisée utilisée pour le calcul de dose par MC, en particulier en présence d'un matériau de densité élevée (os). Cette imprécision est principalement due à la présence d'artefacts dans l'image TDM induits par ce matériau dense. On ajoute à cela la problématique de la dépendance des données de correspondance UH-matériau et UH-densité aux conditions d'acquisition de l'image et au fantôme utilisé pour déterminer ces correspondances. En outre, la simulation du film radiographique avec le code PENELOPE a mis en évidence la mauvaise

réponse du film en milieu hétérogène à cause de la perturbation induite par sa présence dans le milieu et de sa sensibilité aux photons de basse énergie diffusés des milieux denses.

Cette dernière partie a également démontré l'intérêt d'ajouter de matériaux supplémentaires à utilité clinique dans le TPS-MC. Les écarts non négligeables observés entre le calcul de la dose dans le vrai matériau (PENELOPE) et celui dans le matériau attribué par le TPS-MC ont montré la nécessité de dissocier plusieurs compositions d'os (cartilage, os spongieux, os compact, etc.) et de matériaux équivalent-tissu (tissu adipeux, muscle, peau, etc.) pour améliorer la précision sur la dose calculée dans ces matériaux.

Ce travail de thèse a permis de développer une nouvelle méthode d'ajustement du spectre initial en énergie d'un accélérateur linéaire et d'évaluer les performances techniques et dosimétriques du code MC rapide PENFAST. Toutefois, avant sa mise en service opérationnel, il conviendra de :

- Faire une étude plus approfondie de l'influence de la composition des matériaux sur la dose calculée afin de déterminer quels matériaux, rencontrés en clinique, il est nécessaire d'ajouter dans le code PENFAST pour atteindre la précision requise sur la dose calculée. En effet, nous avons montré par comparaison entre PENELOPE (qui dispose de tous les matériaux) et PENFAST (qui dispose uniquement de l'air, l'eau, l'os et le poumon) qu'il est nécessaire d'ajouter des matériaux supplémentaires à intérêt clinique dans PENFAST tels que le cartilage, les tissus adipeux, etc. D'autres types de tissus comme le muscle, la peau, les divers types de tissus osseux, etc. restent à définir et à tester.
- Introduire dans le TPS un algorithme de correction automatique des artefacts induits par la présence d'objets de forte densité. Cela sera particulièrement utile, en cas de présence de prothèse ou plombage dentaire, pour corriger les UH dans les images TDM et donc améliorer la précision sur la conversion des UH en matériaux et masses volumiques et par conséquent sur la dose calculée. Dans la version actuelle du TPS-MC ISOgray™, l'utilisateur peut délimiter la zone artéfactée sur l'image TDM et corriger manuellement les attributions de matériaux et masses volumiques incorrectes.
- Compléter la validation du TPS-MC comme pour tout autre TPS conventionnel suivant les protocoles traditionnels de référence (AAPM 1995 et 1998, ESTRO 2004, IAEA 2004, NCS 2006). Il faudra, par exemple, vérifier l'influence de la distance à la source, de l'asymétrie, des modificateurs de faisceaux (caches moulés, collimateur multilames, filtre en coin), de l'obliquité et l'irrégularité de surface, etc. Il conviendra, en outre, de vérifier

le calcul de dose dans des fantômes anthropomorphiques ou dans des cas cliniques plus proches de la réalité et aussi de tester d'autres machines de traitement (Varian et Elekta).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Agostinelli S. GEANT4 - A simulation toolkit. Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. A 2003; 506: 250-303.

Almond PR, Biggs PJ, Coursey BM, Hanson WF, Huq MS, Nath R, Rogers DWO. AAPM's TG-51 protocol for clinical reference dosimetry of high-energy photon and electron beams. Med. Phys. 1999; 26(9): 1847-70.

American Association of Physicists in Medicine (AAPM). Radiation Treatment Planning Dosimetry Verification. Therapy Committee Task Group n° 23, AAPM Report 55 (1995).

American Association of Physicists in Medicine (AAPM). Quality assurance for clinical radiotherapy treatment planning of the AAPM Radiation Therapy Committee Task Group n° 53. Med. Phys. 1998; 25(10): 1773-829.

Andreo P. Monte Carlo techniques in medical radiation physics. Phys. Med. Biol. 1991; 36 (7): 861-920.

Ahnesjö A and Mackie R. Analytical description of Monte Carlo generated photon dose convolution kernels. Proceedings of the International Conference on the Use of Computers in Radiation Therapy. Elsevier Science Publishers, BV, North Holland. 1987: 197-200.

Ahnesjö A. Collapsed cone convolution of radiant energy for photon dose calculations in heterogeneous media. Med. Phys. 1989; 16: 577-92.

Ahnesjö A and Aspradakis MM. Dose calculations for external photon beams in radiotherapy. Phys. Med. Biol. 1999; 44: R99-R155.

Bakai A, Albert M, Nüsslin F. A revision of the γ -evaluation concept for the comparison of dose distributions. Phys. Med. Biol. 2003; 48: 3543-53.

Baró J, Sempau J, Fernández-Varea JM, Salvat F. PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter. Nucl. Instr. and Meth. B 1995; 100: 31-46.

Berger MJ. Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. Meth. Comput. Phys. 1963; 1: 135-215.

Bieda MR, Antolak JA, Hogstrom KR. The effect of scattering foil parameters on electron-beam Monte Carlo calculations. Med. Phys. 2001; 28(12): 2527-34.

Bielajew AF and Rogers DWO. Variance-reduction techniques. In Monte Carlo Transport of Electrons and Photons. Plenum, New York 1988; 407-19.

Björck A. Numerical Methods for Least Squares Problems. SIAM 1996.

- Bjork P, Knöös T, Nilson P. Influence of initial electron beam characteristics on Monte Carlo calculated absorbed dose distributions for linear accelerator electron beams. *Phys. Med. Biol.* 2002; 47(22): 4019-41.
- Blanpain B and Mercier D. The delta envelope: a technique for dose distribution comparison. *Med. Phys.* 2009; 36(3): 797-808.
- Blazy L, Baltes D, Bordy JM, Cutarella D, Delaunay F, Gouriou J, Leroy E, Ostrowsky A and Beaumont S. Comparison of PENELOPE Monte Carlo dose calculations with Fricke dosimeter and ionization chamber measurements in inhomogeneous phantoms (18 MeV electron and 12 MV photon beams). *Phys. Med. Biol.* 2006; 51: 5951-65.
- Blazy L. Contrôle qualité des systèmes de planification dosimétrique des traitements en radiothérapie externe au moyen du code Monte Carlo PENELOPE. Thèse de l'Université Paul Sabatier (2007).
- Brahme A, Chavaudra J, Landberg T. Accuracy requirements and quality assurance of external beam therapy with photons and electrons. *Acta. Oncol.* 1988 ; suppl. 1: 1-76.
- Bramoullé C. Etude par le code Monte Carlo PENELOPE des faisceaux de rayons X produits par des accélérateurs linéaires d'électrons SL-ELEKTA. Thèse de l'Université Paul Sabatier (2000).
- Brent RP, Some long-period random number generators using shifts and xors. *Proceedings at the Computational Techniques and Applications Conference, Townsville, 3 July 2006. ANZIAM Journal* 2006; 48.
- Briesmeister JF. MCNP - A general Monte Carlo N-particle transport code, version 4A. Report LA-12625-M, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 1993.
- Brown FB. MCNP - A general Monte Carlo-particle transport code, version 5. Report LA-UR-03 1987, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 2003.
- Carrasco P, Jornet N, Duch MA, Weber L, Ginjaume M, Eudaldo T, Jurado D, Riuz A and Ribas M. Comparison of dose calculation algorithms in phantoms with lung equivalent heterogeneities under conditions of lateral electronic equilibrium. *Med. Phys.* 2004; 31: 2899-911.
- Carrasco P, Jornet N, Duch MA, Panettieri V, Weber L, Eudaldo T, Ginjaume M, and Ribas M. Comparison of dose calculation algorithms in slab phantoms with cortical bone equivalent heterogeneities. *Med. Phys.* 2007; 34: 3323-33.
- Chaney EL, Cullip TJ, Gabriel TA. A Monte Carlo study of accelerator head scatter. *Med. Phys.* 1994; 21(9): 1383-90.
- Charland PM, Chetty IJ, Yokoyama S, Fraas BA. Dosimetric comparison of extended dose range film with ionization measurements in water and lung equivalent heterogeneous media exposed to megavoltage photons. *J. Appl. Clin. Med. Phys.* 2003; 4: 25-39.
- Chetty IJ, Rosu M, McShan DL, Fraass BA, Ten Haken RK. The influence of beam model differences in the comparison of dose calculation algorithms for lung cancer treatment planning. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50: 802-15.

- Chetty IJ, Curran B, Cygler JE, DeMarco JJ, Ezzell G, Faddegon BA, Kawrakow I, Keall PJ, Liu H, Ma CM, Rogers DW, Seuntjens J, Sheikh-Bagheri D, Siebers JV. Report of the AAPM Task Group No. 105: issues associated with clinical implementation of Monte Carlo-based photon and electron external beam treatment planning. *Med. Phys.* 2007; 34: 4818-53.
- Childress NL, Bloch C, White RA, Salehpour M, Rosen II. Detection of IMRT delivery errors using a quantitative 2D dosimetric verification system. *Med. Phys.* 2005; 32: 153-62.
- Constantinou C, Harrington JC, DeWerd LA. An electron density calibration phantom for CT-based treatment planning computers. *Med. Phys.* 1992; 19: 325-7.
- Cygler JE, Daskalov GM, Chan GH, Ding GX. Evaluation of the First commercial Monte Carlo dose calculation engine for electron beam treatment planning. *Med. Phys.* 2004; 31:142-153.
- Das I, Moskvina V, Kassaei A, Tabata T, Verhaegen F. Dose perturbations at high-Z interfaces in kilovoltage photon beams: comparison with Monte Carlo simulations and measurements. *Radiat. Phys. Chem.* 2002; 64: 173-79.
- Depuydt T, Van Esch A, Huyskens DP. A quantitative evaluation of IMRT dose distributions: refinement and clinical assessment of the gamma evaluation. *Radiother. Oncol.* 2002; 62: 309-19.
- Ding GX. Energy spectra, angular spread, fluence profiles and dose distributions of 6 and 18 MV photon beams: results of Monte Carlo simulations for a Varian 2100EX accelerator. *Phys. Med. Biol.* 2002; 47: 1025-46.
- Du Plessis FCP, Willemse CA, Lötter MG, Goedhals L. The indirect use of CT numbers to establish material properties needed for Monte Carlo calculation of dose distributions in patients. *Med. Phys.* 1998; 25: 1195-201.
- Esthappen J, Mutic S, Harms WB. Dosimetry of therapeutic photon beams using an extended dose range film. *Med. Phys.* 2002; 29: 2438-48.
- European Society for Therapeutic Radiology and Oncology (ESTRO). Quality assurance of treatment planning systems: practical examples for non-IMRT photon beams. Booklet n° 7 (2004).
- Faddegon B, Schreiber E, Ding X. Monte Carlo simulations of large electron fields. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50(7): 741-53.
- Fippel M. Fast Monte Carlo dose calculations for photon beams based on the VMC electron algorithm. *Med. Phys.* 1999; 26: 1466-75.
- Fix MK, Keall PJ, Siebers JV. Photon-beam subsource sensitivity to the initial electron beam parameters. *Med. Phys.* 2005; 32: 1164-75.
- Ford R and Nelson W. SLAC 210, UC 32, June 1978.
- Fraass BA, Smathers J, Deye J. Summary and recommendations of a National Cancer Institute workshop on issues limiting the clinical use of Monte Carlo calculation algorithms for megavoltage external beam radiation therapy. *Med. Phys.* 2003; 30: 3206-16.

- Fragoso M, Pillai S, Solberg TD, Chetty IJ. Experimental verification and clinical implementation of a commercial Monte Carlo electron beam dose calculation algorithm. *Med. Phys.* 2008; 35:1028-38.
- Francescon P, Cavedon C, Reccanello S, Cora S. Photon dose calculations of a three-dimensional treatment planning system compared to the Monte Carlo code BEAM. *Med. Phys.* 2000; 27: 1579-87.
- Franchisseur E. Modélisation et validation de l'accélérateur PRIMUS de SIEMENS par le code Monte Carlo PENELOPE dans le cadre de la Radiothérapie du Cancer. Thèse de l'université de Nice-Sophia Antipolis (2007).
- Habib B, Poumarède B, Tola F, Barthe J. Evaluation of PENFAST - a fast Monte Carlo code for dose calculations in photon and electron radiotherapy treatment planning. In press (2009). in *Phys. Med.* doi:10.1016/j.ejmp.2009.03.002.
- Hartman Siantar CL, Bergstrom PM, Chandler WP, Chase L, Cox LJ, Daly TP, Garrett D, Hornstein SM, House RK, Moses EI, Patterson RW, Rathkopf JA, Schach von Wiitenau A. Lawrence Livermore National Laboratory's PEREGRINE Project UCRL-JC 126732, 1997.
- Hartmann Siantar CL, Walling RS, Daly TP, Faddegon B, Albright N, Bergstrom P, Bielajew AF, Chuang C, Garrett D, House RK, Knapp D, Wieczorek DJ and Verhey LJ. Description and dosimetric verification of the PEREGRINE Monte Carlo dose calculation system for photon beams incident on a water phantom. *Med. Phys.* 2001; 7: 1322-37.
- Heath E, Seuntjens J, Sheikh-Bagheri D. Dosimetric evaluation of the clinical implementation of the first commercial IMRT Monte Carlo treatment planning system at 6 MV. *Med. Phys.* 2004; 31: 2771-9.
- International Atomic Energy Agency (IAEA). Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy. Technical Reports Series n° 398, 2000.
- International Atomic Energy Agency (IAEA). Commissioning and quality assurance of computerized planning systems for radiation treatment of cancer. Technical Reports Series n° 430, 2004.
- International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU). Dose specification for reporting external beam therapy with photons and electrons. Report n° 24, 1978.
- International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU). Use of computers in external beam radiotherapy procedures with high-energy photons and electrons. Report n° 42, 1987.
- Isambert A. Contrôle de qualité et optimisation de l'acquisition des données en imagerie multimodale pour la radiothérapie externe. Thèse de l'université Paris XI (2009).
- Ju T, Simpson T, Deasy JO, Low DA. Geometric interpretation of the gamma dose distribution comparison technique: Interpolation-free calculation. *Med. Phys.* 2008; 35: 879-87.
- Kawrakow I, Fippel M and Friedrich K. 3D Electron Dose Calculation using a Voxel based Monte Carlo Algorithm. *Med. Phys.* 1996; 23: 445-57.

- Kawrakow I. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. II. Application to ion chamber response simulations. *Med. Phys.* 2000a; 27(3): 499-513.
- Kawrakow I. VMC++, electron and photon Monte Carlo calculations optimized for radiation treatment planning. Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, particle transport simulation and applications. Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23-26 October, pp. 229-36 (2000b).
- Kawrakow I and Fippel M. Investigation of variance reduction techniques for Monte Carlo photon dose calculation using XVMC. *Phys. Med. Biol.* 2000; 45: 2163-84.
- Kawrakow I and Rogers DWO. The EGSnrc code system: Monte Carlo simulation of electron and photon transport. Technical Report PIRS-701, National Research Council of Canada, Ottawa, Ontario, 2000.
- Keall P and Hoban P. Superposition dose calculations incorporating Monte Carlo generated electron track kernels. *Med. Phys.* 1996; 23: 479-85.
- Krieger T and Sauer OA. Monte Carlo versus pencil beam/collapsed-cone dose calculation in a heterogeneous multi-layer phantom. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50: 859-68.
- Laub WU, Bakai A, Nüsslin F. Intensity modulated irradiation of a thorax phantom: comparisons between measurements, Monte Carlo calculations and pencil beam calculations. *Phys. Med. Biol.* 2001; 46: 1695-706.
- Lawson CL and Hanson RJ. Solving Least Squares Problems. CIAM (15). Prentice-Hall, Englewood, Cliffs, New Jersey, 1974.
- Leal A, Sanchez-Doblado F, Arrans R, Rosello J, Pavon CE, Lagares JI. Routine IMRT verification by means of an automated Monte Carlo simulation system. *Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.* 2003; 56: 58-68.
- Libby B, Siebers J, Mohan R. Validation of Monte Carlo generated phase-space descriptions of medical linear accelerator. *Med. Phys.* 1999; 26(8): 1476-83.
- Lin SY, Chu TC, Lin JP. Monte Carlo simulation of a clinical linear accelerator. *Appl. Radiat. Isot.* 2001; 55(6), 759-65.
- Lovelock DM, Chui CS, Mohan R. A Monte Carlo model of photon beams used in radiation therapy. *Med. Phys.* 1995; 22(9): 1387-94.
- Low DA, Harms WB, Mutic S, Purdy JA. A technique for the quantitative evaluation of dose distributions. *Med. Phys.* 1998; 25: 656-61.
- Low DA and Dempsey. Evaluation of the gamma dose distribution comparison method. *Med. Phys.* 2003; 30: 2455-64.
- Lux I and Koblinger L. Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations. CRC Press, 1991.
- Ma CM and Jiang SB. Monte Carlo modelling of electron beams from medical Accelerators. *Phys. Med. Biol.* 1999; 44: R157-R189.

- Ma CM, Mok E, Kapur A, Pawlicki T, Findley D, Brain S, Forester K, Boyer AL. Clinical implementation of a Monte Carlo treatment planning system. *Med. Phys.* 1999; 26: 2133-43.
- Mackie TR, Scrimger JW, Battista JJ. A convolution method of calculating dose for 15-MV X-rays. *Med. Phys.* 1985; 12: 188-96.
- Mackie TR. Applications of the Monte Carlo method in radiotherapy. *The Dosimetry of Ionizing Radiation*, vol. III. Academic Press, New York, 1990: 541-620.
- Martens C, Claeys I, Wagter CD, Neve WD. The value of radiographic film for the characterization of intensity-modulated beams. *Phys. Med. Biol.* 2002a; 47: 2221-34.
- Martens C, Reynaert N, De Wagter C, Nilsson P, Coghe M, Palmans H, Thierens H, De Neve W. Underdosage of the upper-airway mucosa for small fields as used in intensity-modulated radiation therapy: a comparison between radiochromic film measurements, Monte Carlo simulations and collapsed cone convolution calculations. *Med. Phys.* 2002b; 29: 1528-35.
- Mascagni M. SPRNG: A Scalable Library for Pseudorandom Number Generation. *Proceedings of the 4th International Conference on Numerical Methods and Applications*, Sofia, Bulgaria 19-23 August 1998. World Scientific, 1999.
- The MathWorks 2005. MATLAB – The language of technical computing, version 7.
- Mayer R, Williams A, Frankel T, Cong Y, Simons S, Yang N, Timmerman R. Two-dimensional film dosimetry application in heterogeneous materials exposed to megavoltage photon beams. *Med. Phys.* 1997; 24: 455-60.
- Mazurier J, Salvat F, Chauvenet B, Barthe J. Simulation of photon beams from a Saturn 43 accelerator using the code PENELOPE. *Phys. Med.* 1999; 15 (3): 101-10.
- McCaffrey JP, Mainegra-Hing E, Kawrakow I, Shortt KR, Rogers DWO. Evidence for using Monte Carlo calculated wall attenuation and scatter correction factors for three styles of graphite-walled ion chamber. *Phys. Med. Biol.* 2004; 49(12): 2491-501.
- Mesbahi A, Reilly AJ, Thwaites DI. Development and commissioning of a Monte Carlo photon beam model for Varian Clinac 2100EX linear accelerator. *Appl. Radiat. Isot.* 2006; 64(6): 656-62.
- Mijnheer BJ, Battermann JJ, Wambersie A. Reply to: Precision and accuracy in radiotherapy (by Brenner DJ). *Radiother. Oncol.* 1989; 14: 163-9.
- Mohan R, Chui C, Lidofsky L. Energy and angular distributions of photons from medical linear accelerators. *Med Phys.* 1985; 12(5): 592-7.
- Mohan R. Why Monte Carlo? *Proceedings of the 12th International Conference on the Use of Computers in Radiation Therapy*, Salt Lake City, UT, USA, 1997: 16-8.
- Mohan R, Antolak J, Hendee WR. Monte Carlo techniques should replace analytical methods for estimating dose distributions in radiotherapy treatment planning. *Med. Phys.* 2001; 28: 123-6.

MPI-2: Extensions to the message-passing interface. Message Passing Interface Forum, 18 July 1997.

Nelms BE and Simon JA. A survey on planar IMRT QA analysis. *J. Appl. Clin. Med. Phys.* 2007; 8:76-90.

Nelson WR Hiramata H, Rogers DWO. The EGS4 Code System. Report SLAC-265. Stanford Linear Accelerator, Stanford, CA, 1985.

Netherlands Commission on Radiation Dosimetry (NCS). Quality assurance in 3D treatment planning systems for external photon and electron beams. Report n° 15 (2006).

Neuenschwander H and Born EJ. A macro Monte-Carlo method for electron-beam dose calculations. *Phys. Med. Biol.* 1992; 37: 107-25.

Neuenschwander H, Mackie TR and Reckwerdt PJ. MMC – A high-performance Monte Carlo code for electron beam treatment planning. *Phys. Med. Biol.* 1995; 40: 543-74.

Paelinck L, Reynaert N, Thierens H, De Neve W, De Wagter C. Experimental verification of lung dose with radiochromic film: comparison with Monte Carlo simulations and commercially available treatment planning systems. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50: 2055-69.

Papanikolaou N, Battista J, Boyer A, Kappas C, Klein E, Mackie TR, Sharpe M, Van Dyk J. Tissue Inhomogeneity Corrections for Megavoltage Photon Beams. AAPM Report n° 85, Task Group n° 65 of the Radiation Therapy Committee of the American Association of Physicists in Medicine. Medical Physics Publishing, Madison, WI, 2004.

Pena J, Franco L, Gomez F, Iglesias A, Lobato R, Mosquera J, Pazos A, Pardo J, Pombar M, Rodriguez A, Sendon J. Commissioning of a medical linear accelerator photon beam Monte Carlo simulation using wide-field profiles. *Phys. Med. Biol.* 2004 ; 49(21) : 4929-42.

Pena J, González-Castaño DM, Gómez F, Sánchez-Doblado F, Hartmann GH. Automatic determination of primary electron beam parameters in Monte Carlo simulation. *Med. Phys.* 2007; 34(3): 1076-84.

Popple RA, Weinberg R, Antolak JA, Ye SJ, Pareek PN, Duan J, Shen S, Brezovich IA. Comprehensive evaluation of a commercial macro Monte Carlo electron dose calculation implementation using a standard verification data set. *Med. Phys.* 2006; 33 (6): 1540-51.

Poumarède B, Tola F, Habib B. TELEDOS: Bulletin de validation pour code de calcul (gain en performance et en précision). Délivrable TELEDOS SP2.4. 2008.

Press WH, Teukolsky SA, Vetterling WT, Flannery BP. Numerical Recipes in Fortran 90 - The Art of Parallel Scientific Computing. 2nd ed. Cambridge University Press, 1996.

Rao CR, Toutenburg H, Fieger A, Heumann C, Nittner T, Scheid S. Linear Models: Least Squares and Alternatives. Springer Series in Statistics 1999.

Reynaert N, van der Marck SC, Schaart DR, Van der Zee W, Van Vliet-Vroegindeweij C, Tomej M, Jansen J, Heijmen B, Coghe M and De Wagter C. Monte Carlo treatment planning for photon and electron beams. *Radiat. Phys. Chem.* 2007; 76: 643-86.

Rogers DWO and Bielajew AF. Monte Carlo techniques of electron and photon transport in radiation dosimetry. The Dosimetry of Ionizing Radiation, vol. III. Academic Press, New York, 1990: 427-539.

Rogers DWO, Faddegon BA, Ding GX, Ma CM, We J, Mackie TR. Beam: A Monte Carlo code to simulate radiotherapy treatment units. Med. Phys. 1995; 22: 503-23.

Salvat F and Fernández-Varea JM. Semiempirical cross sections for the simulation of the energy loss of electrons and positrons in matter. Nucl. Instr. and Meth. B 1992; 63: 255-69.

Salvat F, Fernández-Varea JM, Baró J, Sempau J. PENELOPE, an algorithm and computer code for Monte Carlo simulation of electron-photon showers. Informes Técnicos Ciemat 799, CIEMAT, Madrid, Spain 1996.

Salvat F, Fernández-Varea JM, Acosta E, Sempau J. PENELOPE – A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. OECD ISBN 92-64-18475-9, Issy-les-Moulineaux, France 2001.

Salvat F, Fernández-Varea JM, Sempau J. PENELOPE-2006, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. OECD ISBN 92-64-02301-1, Barcelona, Spain 2006.

Salvat F. Photons: theoretical background-PENELOPE Symposium on Monte Carlo treatment planning systems: for a new paradigm in radiotherapy. Institut Gustave Roussy Villejuif, France (2008a).

Salvat F. Electrons: theoretical background-PENELOPE Symposium on Monte Carlo treatment planning systems: for a new paradigm in radiotherapy. Institut Gustave Roussy Villejuif, France (2008b).

Salvat F, Brualla L, Sempau J. Simulation of electron-photon transport in CT structures using PENELOPE and a new dedicated transport algorithm. In preparation.

Schneider W, Bortfeld T, Schlegel W. Correlation between CT numbers and tissue parameters needed for Monte Carlo simulations of clinical dose distributions. Phys. Med. Biol. 2000; 45: 459-78.

Schreiber EC and Faddegon BA. Sensitivity of large-field electron beam to variations in a Monte Carlo accelerator model. Phys. Med. Biol. 2005; 50(7): 769-78.

Sempau J, Acosta E, Baró J, Fernández-Varea JM, Salvat F. An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron-photon transport. Nucl. Instr. and Meth. B 1997; 132 (3): 377-90.

Sempau J, Wilderman SJ and Bielajew AF. DPM – a fast, accurate Monte Carlo code optimized for photon and electron radiotherapy treatment planning dose calculations. Phys. Med. Biol. 2000; 45: 2263-91.

Sempau J, Sanchez-Reyes A, Salvat F, Oulad ben Tahar H, Jiang SB, Fernández-Varea JM. Monte Carlo simulation of electron beams from an accelerator head using PENELOPE. Phys. Med. Biol. 2001; 46: 1163-86.

- Sempau J, Fernández-Varea JM, Acosta E and Salvat F. Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE. Nucl. Instr. and Meth. B 2003; 207: 107-23.
- Serrano B. Validation physique par Monte Carlo de la modulation d'intensité sur l'accélérateur Primus et le système de plan de traitement Helax TMS. Application aux tumeurs cancéreuses ORL. Thèse de l'Université Nice-Sophia Antipolis (2006).
- Sheikh-Bagheri D, Rogers DWO, Ross CK, Seuntjens JP. Comparison of measured and Monte Carlo calculated dose distributions from the NRC linac. Med. Phys. 2000; 27: 2256-66.
- Sheikh-Bagheri D and Rogers DWO. Sensitivity of megavoltage photon beam Monte Carlo simulations to electron beam and other parameters. Med. Phys. 2002a; 29(3): 379-90.
- Sheikh-Bagheri D and Rogers DWO. Monte Carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the BEAM code. Med. Phys. 2002b; 29(3): 391-402.
- Siebers JV, Keall PJ, Kim J, Mohan R. Performance benchmarks of the MCV Monte Carlo System. Proceedings of the 13th International Conference on the use of Computers in Radiation. Springer-Verlag, Heidelberg, 2000: 129-31.
- Solberg TD, DeMarco JJ, Holly FE, Smathers JB, DeSalles AAF. Monte Carlo treatment planning for stereotactic radiotherapy. Radiother. Oncol. 1998; 49: 73-84.
- Stock M, Kroupa B, Georg D. Interpretation and evaluation of the γ index and the γ index angle for the verification of IMRT hybrid plans. Phys. Med. Biol. 2005; 50: 399-411.
- Suchowerska N, Hoban P, Davison A, Metcalfe P. Perturbation of radiotherapy beams by radiographic film: measurements and Monte Carlo simulations. Phys. Med. Biol. 1999; 44: 1755-65.
- Tola F, Morrow S, Berthelot C, Simon AC. TELEDOS: Spécification de design logiciel pour code de calcul – Parallélisation des codes Penelope et Penfast. Délivrable TELEDOS SP2.3. 2006.
- Tzedakis A, Damilakis JE, Mazonakis M, Stratakis J, Varveris H, Gourtsoyiannis N. Influence of initial electron beam parameters on Monte Carlo calculated absorbed dose distributions for radiotherapy photon beams. Med. Phys. 2004; 31(4): 907-13.
- Vanderstraeten B, Chin PW, Fix M, Leal A, Mora G, Reynaert N, Seco J, Soukup M, Spezi E, De Neve W, Thierens H. Conversion of CT numbers into tissue parameters for Monte Carlo dose calculations: a multi-centre study. Phys. Med. Biol. 2007; 52: 539-62.
- Van Dyk J, Barnett RB, Cygler JE, Shragge PC. Commissioning and quality assurance of treatment planning computers. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. 1993; 26: 261-73.
- Van Esch A, Bohsung J, Sorvari P, Tenhunen M, Paiusco M, Iori M, Engström P, Nyström H, Huyskens DP. Acceptance tests and quality control (QC) procedures for the clinical implementation of intensity modulated radiotherapy (IMRT) using inverse planning and the sliding window technique: experience from five radiotherapy departments. Radiother. Oncol. 2002; 65: 53-70.

- Vassard C. Rapport de benchmark dans le cadre du projet TELEDOS. Rapport TELEDOS (juin 2007).
- Venselaar J, Welleweerd H, Mijnheer B. Tolerances for the accuracy of photon beam dose calculations of treatment planning systems. *Radiother. Oncol.* 2001; 60: 191-201.
- Verhaegen F and Devic S. Sensitivity study for CT image use in Monte Carlo treatment planning. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50: 937-46.
- Verhaegen F and Seuntjens J. Monte Carlo modelling of external radiotherapy photon beams. *Phys. Med. Biol.* 2003; 48: R107-64.
- Wang L, Lovelock M, Chui CS. Experimental verification of a CT-based Monte Carlo dose calculation method in heterogeneous phantoms. *Med. Phys.* 1999; 26: 2626-34.
- Wang L and Leszczynski K. Estimation of the focal spot size and shape for a medical linear accelerator by Monte Carlo simulation. *Med. Phys.* 2007; 34(2): 485-8.
- Wolberg J. *Data Analysis Using the Method of Least Squares: Extracting the Most Information from Experiments.* Springer 2005.
- Woo MK and Cunningham JR. The validity of the density scaling method in primary electron transport for photon and electron beams. *Med. Phys.* 1990; 17: 187-94.
- Yang J, Li J, Chen L, Price R, McNeeley S, Qin L, Wang L, Xiong W, Ma CM. Dosimetric verification of IMRT treatment planning using Monte Carlo simulations for prostate cancer. *Phys. Med. Biol.* 2005; 50: 869-78.

Annexe A

LE CODE MONTE CARLO PENELOPE

Cette annexe fournit une description détaillée de la structure du code PENELOPE composé d'un ensemble de programmes dédiés à la gestion de la partie physique et de trois fichiers d'entrée pour gérer les paramètres de simulation et la géométrie. Les modèles physiques utilisés dans le code pour simuler le transport des électrons, positons et photons sont également décrits.

1. Structure du code PENELOPE

Le code PENELOPE est constitué d'un ensemble de programmes écrits en FORTRAN77. La Figure 1 schématise l'ensemble des programmes et des fichiers d'entrée permettant la simulation avec PENELOPE. La simulation est pilotée par le programme principal PENMAIN en faisant appel aux trois fichiers d'entrée (FICHIER.in, FICHIER.mat et FICHIER.geo) et aux deux autres programmes PENELOPE et PENGEO.

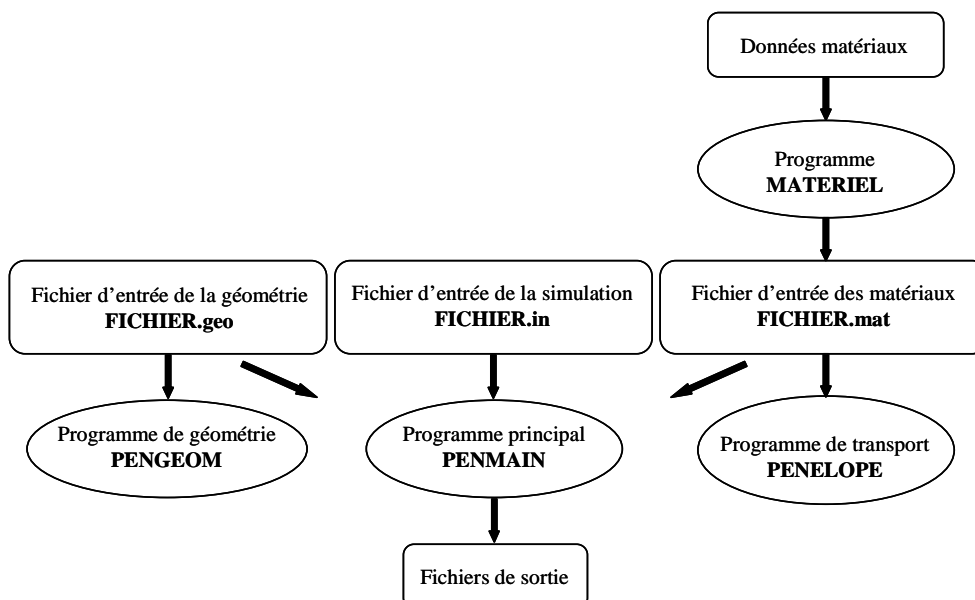


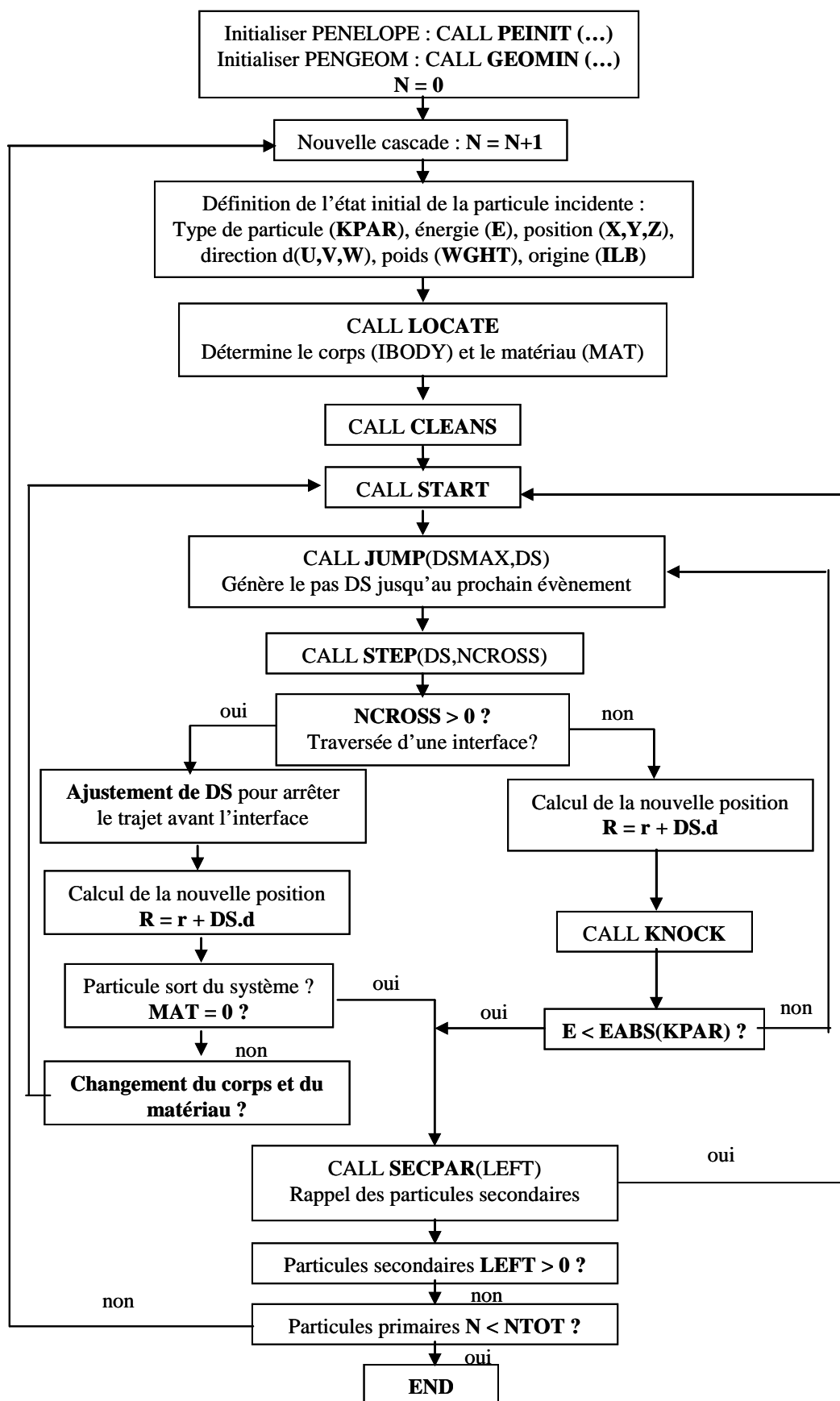
Figure 1 : Structure de l'ensemble des programmes et fichiers d'entrée du code PENELOPE.

1.1. Programme principal PENMAIN

Le programme principal PENMAIN gère les appels aux différents programmes concernant la géométrie, les matériaux et la physique. Il calcule et stocke les moyennes des grandeurs d'intérêt générées par le modèle de diffusion contenu dans le programme PENELOPE à la fin de la simulation.

PENMAIN est structuré pour que l'histoire d'une particule soit générée comme une séquence de sauts ou « jumps ». A la fin de chaque déplacement, la particule subit une interaction, au cours de laquelle elle perd de l'énergie, change de direction et dans certains cas, produit une particule secondaire. Les électrons et les photons sont simulés selon le schéma présenté sur la Figure 2 en faisant appel aux divers sous-programmes suivants (Salvat *et al.* 2006) :

- PEINIT qui initialise les variables d'entrée de la simulation avec les données du fichier d'entrée FICHIER.in.
- GEOMIN qui lit le fichier décrivant la géométrie en vérifiant son exactitude. Il détermine le nombre NBODY de corps décrits et le nombre NMAT de matériaux composant cette géométrie.
- LOCATE qui localise la particule (X,Y,Z) dans la géométrie en repérant le corps (IBODY) et le matériau (MAT).
- CLEANS qui initialise à zéro le compteur des particules secondaires créées lors des interactions engendrées par une particule primaire.
- START qui force le prochain événement à être traité comme un événement « mou ». Ce sous-programme est appelé avant de débiter la simulation d'une particule primaire ou secondaire et lorsqu'une particule traverse une interface. Il est uniquement nécessaire pour la simulation des électrons et des positons. Pour les photons, START n'a aucun effet, cependant il est préférable de l'appeler pour tous les types de particules puisqu'il vérifie que l'énergie de la particule soit bien comprise dans l'intervalle attendu.
- JUMP qui détermine la longueur DS du pas jusqu'au prochain événement. La position de cet événement est alors calculée. Si la particule doit traverser une interface, la particule est stoppée juste après l'interface et la longueur DS est réévaluée. Si la particule sort du système, la simulation de la particule est terminée. L'étude des particules secondaires peut débiter.

Figure 2 : Algorithme du programme principal PENMAIN du code PENELOPE (Salvat *et al.* 2006).

- STEP qui déplace la particule d'une distance DS déterminée au cours de JUMP puis localise sa nouvelle position ainsi que le matériau qui compose le milieu. Il détermine également le nombre NCROSS d'interfaces traversées.
- KNOCK qui simule l'événement suivant, calcule la nouvelle énergie et la direction de la trajectoire de la particule et enregistre les états initiaux des particules secondaires éventuellement générées dans la pile secondaire. La simulation d'une particule est stoppée si son énergie est inférieure à l'énergie de coupure EABS.
- SECPAR qui initialise la simulation de chaque particule secondaire et la retire de la pile. Le paramètre LEFT correspond au nombre de particules secondaires restantes dans la pile. Lorsque LEFT = 0, une nouvelle particule primaire est générée.

1.2. Fichiers d'entrée

Les paramètres concernant les particules simulées, la géométrie du milieu et sa composition sont définis et gérés par les trois fichiers d'entrée FICHIER.in, FICHIER.geo et FICHIER.mat auxiliaires au programme principal PENMAIN.

1.2.1. Fichier d'entrée principal FICHIER.in

Le fichier d'entrée principal FICHIER.in contient tous les paramètres nécessaires à l'initialisation des simulations. Il rassemble les paramètres suivants à spécifier par l'utilisateur (Salvat *et al.* 2006) :

- KPAR qui est le type de particule. Il est égal à 1 pour les électrons, à 2 pour les photons et à 3 pour les positons.
- SENERG qui est l'énergie en eV des particules primaires incidentes dans le cas d'une source monoénergétique. Dans le cas d'un spectre de rayonnement, chaque SPECTR ligne définit une énergie E_i du spectre et la probabilité relative associée P_i .
- SPOSIT(X,Y,Z) qui sont les coordonnées en cm de la position initiale de la source de rayonnement.
- SDIREC(THETA,PHI) qui sont l'angle polaire θ et l'angle azimutal Φ en degrés donnant la direction initiale de l'axe du faisceau.
- SAPERT qui est l'angle apparent en degré du faisceau initial.
- NMAT qui est le nombre de matériaux différents dans l'ensemble du système modélisé.

-
- EABS(KPAR) qui est l'énergie de coupure en eV pour chaque type de particules. Une particule est supposée absorbée dans le milieu si son énergie cinétique est inférieure à la valeur EABS, une autre particule est alors simulée. Les positons sont annihilés après absorption.
 - C1, C2, Wcc et Wcr qui sont les valeurs de coupures caractéristiques du processus de la simulation mixte :
 - C1 est lié à la déflexion angulaire moyenne produite par la diffusion élastique multiple le long d'un parcours égal au libre parcours moyen entre deux événements élastiques « catastrophiques ». C1 varie de 0 pour la simulation purement détaillée à 0,2 qui correspond à un angle de déflexion moyen de 37 degrés.
 - C2 est la fraction moyenne maximale d'énergie perdue entre deux événements élastiques « catastrophiques ». Sa valeur varie de 0 à 0,2.
 - Wcc et Wcr sont la perte d'énergie seuil en eV pour les collisions « catastrophiques » inélastiques et pour l'émission de rayonnement de freinage respectivement.
 - DSMAX qui est le parcours moyen maximal en cm entre deux événements « catastrophiques » pour chaque matériau. Ce paramètre est utile pour commander le nombre moyen d'événements « mous » subis par un électron ou un positon dans un milieu mince. La simulation n'est fiable que lorsque le nombre moyen d'événements « mous » subis par chaque électron ou positon est statistiquement suffisant (supérieur ou égal à dix). Dans nos simulations, DSMAX est choisi légèrement inférieur à 1/10 de la largeur de chaque milieu homogène fin. C'est particulièrement important dans le cas d'une tête d'accélérateur linéaire d'électrons vu la présence d'une ou plusieurs feuilles diffusantes le long du trajet du faisceau.
 - PFILENAME qui est le nom du fichier d'entrée des matériaux FICHIER.mat.
 - GEOMFN qui est le nom du fichier d'entrée de la géométrie FICHIER.geo.
 - NSIMSH qui est le nombre maximal de particules primaires à simuler et TIME qui est le temps maximal de la simulation en secondes. NSIMSH et TIME sont deux paramètres d'arrêt de la simulation ajustés par l'utilisateur.
 - Enfin, les paramètres relatifs aux différentes techniques de réduction de variance proposées dans PENELOPE et décrites dans le Chapitre II, Paragraphe 3.

1.2.2. Fichier d'entrée des matériaux FICHIER.mat

Le fichier d'entrée FICHIER.mat contient tous les paramètres nécessaires pour la simulation des interactions des électrons, positons et photons dans chaque matériau, en particulier les sections efficaces nécessaires au modèle de diffusion. Ce fichier est généré par le programme MATERIAL qui permet la modélisation de nombreux milieux simples (élément de numéro atomique allant de 1 à 99) ou composés (tels que l'eau, l'air, l'os, le muscle, le poumon rencontrés en radiothérapie ou encore les alliages présents dans la tête des accélérateurs linéaires d'électrons). L'utilisateur peut créer un nouveau matériau composé avec le programme MATERIAL en spécifiant le nombre d'éléments constituant le matériau, le numéro atomique de chaque élément et sa proportion (index stoïchiométrique ou fraction massique) ainsi que la masse volumique.

1.2.3. Fichier d'entrée de la géométrie FICHIER.geo

Le fichier d'entrée FICHIER.geo contient toutes les données relatives à la géométrie. La structure géométrique utilisée par le code PENELOPE est divisée en corps (BODY) définis par leur matériau de composition, les surfaces quadratiques qui les délimitent et le pointeur correspondant ($SP = \pm 1$). Ces surfaces sont définies par une fonction quadratique générale du type :

$$F(x, y, z) = A_{xx}x^2 + A_{yy}y^2 + A_{zz}z^2 + A_{xy}xy + A_{xz}xz + A_{yz}yz + A_x x + A_y y + A_0 = 0 \quad (\text{Eq. 1})$$

dont l'équation réduite est :

$$F(x, y, z) = I_1x^2 + I_2y^2 + I_3z^2 + I_4z + I_5 = 0 \quad (\text{Eq. 2})$$

Les indices I_i prennent la valeur -1, 0 ou 1 pour définir des surfaces de base (sphères, cylindres, cônes, ellipsoïdes, paraboloides, etc.). Le Tableau 1 regroupe les surfaces et indices associés utilisés pour modéliser avec le code PENELOPE les différentes géométries de notre étude.

Tableau 1: Equations réduites des différentes surfaces quadratiques utilisées dans notre étude.

Equation réduite	Indices					Type de géométrie
	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	
$z-1=0$	0	0	0	1	-1	Plan
$z^2-1=0$	0	0	1	0	-1	Paire de plans parallèles
$x^2+y^2+z^2-1=0$	1	1	1	0	-1	Sphère
$x^2+y^2-1=0$	1	1	0	0	-1	Cylindre
$x^2+y^2-z^2=0$	1	1	-1	0	0	Cône

Une surface quadratique $F(x, y, z)$ limite l'espace en deux régions exclusives identifiées par le signe du pointeur de surface. Un point de coordonnées (x_0, y_0, z_0) se trouve en-dessous ou à l'intérieur d'une surface $F(x, y, z) = 0$, si $F(x_0, y_0, z_0) < 0$ (SP = -1) et au-dessus ou à l'extérieur de cette surface si $F(x_0, y_0, z_0) > 0$ (SP = +1).

Par ailleurs, plusieurs transformations peuvent être appliquées à ces surfaces de base pour adapter la géométrie aux dimensions réelles de l'objet modélisé. Ces surfaces peuvent subir un agrandissement, une translation ou une rotation définie par les angles d'Euler (Ω, θ, Φ).

En outre, des corps limités par les surfaces quadriques peuvent être groupés dans des modules qui, alternativement, peuvent faire partie de plus grands modules. Cette structure hiérarchique permet une grande simplification de la structure géométrique en vue d'accélérer la localisation d'un point dans la géométrie.

Un programme de visualisation appelé GVIEW permet de vérifier la description de la géométrie en deux dimensions ou trois dimensions avant d'exécuter la simulation.

1.3. Programme de géométrie PENGEO

Le programme PENGEO permet de suivre la localisation des interactions dans des systèmes géométriques complexes. PENGEO est composé d'un ensemble de sous-programmes qui sont principalement GEOMIN, LOCATE et STEP (décrits précédemment dans le Paragraphe 1.1). Ces sous-programmes sont appelés par le programme principal PENMAIN pour contrôler les déplacements spatiaux et les traversées d'interface entre deux milieux.

1.4. Programme de transport PENELOPE

Le programme PENELOPE contient les modèles de diffusion permettant de décrire l'intégralité des phénomènes physiques d'interactions des particules. La gestion du transport

des particules dans le milieu suivant le modèle de diffusion de PENELOPE est détaillée dans le paragraphe suivant.

2. Modèle de diffusion du code PENELOPE

Les sections efficaces différentielles sont généralement connues numériquement, ce qui demande énormément de mémoire informatique pour les stocker et un gros travail d'interpolation pour l'échantillonnage. Une des différences entre le code PENELOPE et les autres codes MC est que le modèle de diffusion de PENELOPE réunit les sections efficaces totales numériques (tabulées) avec les sections efficaces différentielles analytiques pour les différents types d'interaction. Il renormalise les valeurs obtenues par l'échantillonnage des fonctions analytiques par rapport aux données connues numériquement. En utilisant des expressions analytiques, PENELOPE évite ainsi les erreurs d'échantillonnage provenant de l'interpolation numérique et accélère l'échantillonnage.

En ce qui concerne les matériaux composés, tant que l'énergie de liaison moléculaire peut être négligée, les sections efficaces des molécules sont calculées en utilisant la règle de l'additivité (c'est-à-dire la section efficace d'une molécule est la somme des sections efficaces des différents atomes dans la molécule).

Ce paragraphe décrit comment le code PENELOPE simule le transport des électrons, positons et photons en gérant les différentes interactions subies par ces particules dans la matière.

2.1. Simulation du transport des photons dans la matière

Le transport des photons est simulé par le biais de la simulation dite « détaillée » puisque les photons subissent peu d'interactions dans le milieu. L'histoire de chaque photon débute à une position donnée avec une direction et une énergie initiales. Chaque histoire simulée est donc caractérisée, au fur et à mesure des interactions, par une série de données comprenant la position, l'énergie et la direction. La détermination de la longueur du trajet à parcourir jusqu'à la prochaine interaction, le mécanisme de diffusion, le changement de direction et la perte d'énergie sont échantillonnés à partir des distributions de probabilité correspondantes (sections efficaces).

Tout d'abord, en considérant la distribution d'atténuation exponentielle, la longueur DS du trajet à parcourir, jusqu'à la prochaine interaction, est déterminée par la formule d'échantillonnage suivante :

$$DS = -\lambda \ln R \quad (\text{Eq. 3})$$

où λ est le libre parcours moyen pour l'ensemble des interactions et R un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

Ensuite, une autre séquence de nombres aléatoires, échantillonnée à partir des distributions de probabilité d'occurrence de chaque interaction, détermine le type d'interaction, l'énergie perdue et l'angle radial de diffusion. L'angle azimutal est généré à partir d'une distribution uniforme sur l'intervalle $[0, 2\pi]$ dans le référentiel de la particule. Enfin, la direction du mouvement après l'interaction est obtenue par des rotations à partir de la direction initiale.

La simulation complète de l'histoire d'un photon (simulation de toutes les particules secondaires créées par le photon primaire incident) s'effectue en répétant chacune de ces étapes jusqu'à ce que la particule sorte du système impliqué ou que l'énergie de la particule soit inférieure à l'énergie de coupure EABS choisie. La valeur de cette énergie de coupure est à adapter pour la simulation des photons.

Dans le domaine d'énergie couvert par le code PENELOPE (allant de quelques centaines d'eV à 1 GeV), les interactions dominantes pour les photons sont la diffusion cohérente (Rayleigh), la diffusion incohérente (Compton), l'effet photoélectrique et la production de paire. Les sections efficaces utilisées par le code PENELOPE pour simuler ces différents types d'interaction sont présentées dans le Tableau 2. Des informations complémentaires sur ces mécanismes peuvent être recueillies dans Baró *et al.* (1995), Sempau *et al.* (1997), Salvat *et al.* (1996, 2001 et 2006).

Tableau 2 : Sections efficaces décrivant les interactions des photons avec la matière dans le code PENELOPE.

Interaction	Sections efficaces
Diffusion Rayleigh	Sections efficaces différentielles de Born
Diffusion Compton	Sections efficaces différentielles de Klein-Nishina corrigée des effets dus aux électrons liés Direction de l'électron et énergie du photon calculées à partir des lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement
Effet photoélectrique	Sections efficaces obtenues à partir de la bibliothèque LLNL Evaluated Photon Data Library Direction de l'électron échantillonnée à partir des sections efficaces de Sauter
Production de paire	Sections efficaces obtenues à partir du programme XCOM de Berger et Hubbell Energie initiale échantillonnée à partir des sections efficaces de Bethe-Heitler

2.2. Simulation du transport des électrons et positons dans la matière

Les électrons, de par l'interaction coulombienne omniprésente, subissent un nombre considérable d'interactions ce qui rend aujourd'hui quasi-impossible la simulation détaillée du transport de ces particules. Le code PENELOPE utilise une théorie mixte (appelée aussi simulation de classe II dans la terminologie de Berger 1963) pour simuler le transport des électrons et des positons. Cette théorie combine la simulation détaillée des événements dits « catastrophiques » (ou « hard » en anglais) avec la simulation condensée des événements dits « mous » (ou « soft » en anglais). Les événements « catastrophiques » sont tels que l'énergie perdue et l'angle de diffusion des particules sont supérieurs aux valeurs seuils choisies de l'énergie perdue ou de l'angle de diffusion. En revanche, les événements « mous » se caractérisent par des pertes d'énergie et des angles de diffusion qui sont inférieures à ces valeurs seuils. L'effet global d'un grand nombre d'événements « mous », entre deux événements « catastrophiques », peut être simulé avec précision en utilisant l'approche de la diffusion multiple. Un choix judicieux de ces valeurs seuils de l'énergie perdue et de l'angle de diffusion permet la simulation détaillée des interactions lorsque l'énergie et donc le nombre d'interactions « catastrophiques » par trajet primaire est faible. Néanmoins, le temps de calcul augmente rapidement quand les valeurs seuils diminuent, ce qui oblige à un compromis entre la simulation détaillée et la simulation condensée.

La Figure 3 représente l'algorithme de la théorie mixte pour un électron ou un positon évoluant dans un milieu simple ou composé comme il est décrit dans PENELOPE.

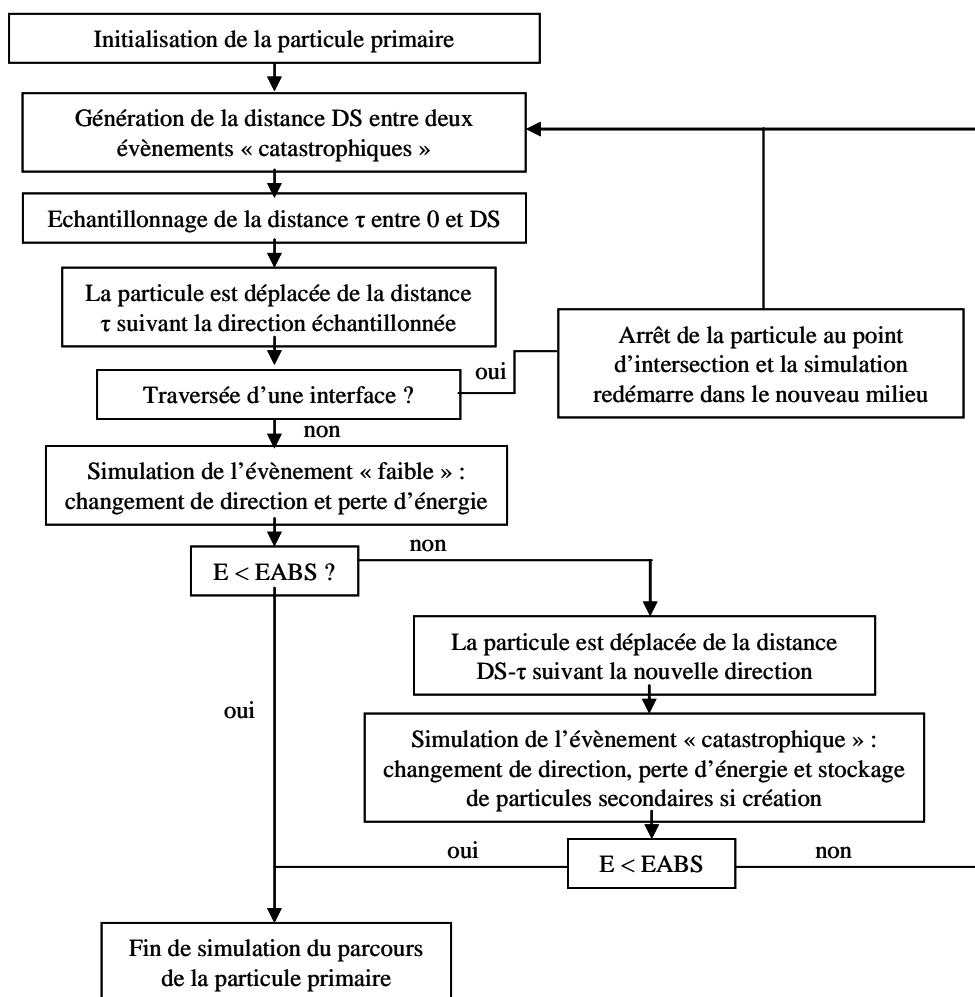


Figure 3 : Algorithme de simulation du parcours d'un électron (ou positon) primaire selon la théorie mixte de PENELOPE.

La distance DS entre deux événements « catastrophiques » successifs est échantillonnée à partir de la relation suivante :

$$DS = -\lambda_c \ln R \quad (\text{Eq. 4})$$

où λ_c est le libre parcours moyen entre deux événements « catastrophiques » successifs et R un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

Cette relation ne s'applique pas si DS est supérieure à la valeur seuil DSMAX choisie. Dans ce cas, DS devient égale à DSMAX avec DSMAX longueur maximale de déplacement d'un électron sans événement « catastrophique ».

Pendant le trajet entre deux événements « catastrophiques », l'électron subit normalement un très grand nombre d'interactions à faible perte d'énergie et faible déflexion angulaire. PENELOPE simule ces interactions en considérant l'effet global de toutes ces « petites interactions » comme un événement unique « mou ». La position τ de cet événement « mou »

est échantillonnée sur la distance DS . La déflexion angulaire ainsi que la perte d'énergie de l'électron sont échantillonnées selon la théorie de la diffusion multiple. L'électron est ensuite déplacé de la distance $(DS-\tau)$ dans la nouvelle direction. Dans le cas où la trajectoire traverse une interface, la particule est stoppée au point d'intersection et la simulation redémarre dans le nouveau milieu. L'évènement « catastrophique » est ensuite simulé. Le changement de direction et la perte d'énergie qui lui sont associés sont échantillonnés d'après les sections efficaces appropriées.

La simulation complète de l'histoire d'un électron s'effectue en répétant chacune de ces étapes jusqu'à ce que la particule sorte du système impliqué ou que l'énergie de la particule soit inférieure à l'énergie de coupure EABS choisie. Les valeurs des énergies de coupure, de l'énergie perdue maximale, de l'angle de diffusion maximale et de la distance maximale entre deux évènements « catastrophiques » sont à adapter pour les simulations d'électrons et de positons.

Les interactions possibles des électrons et positons avec la matière, sont la diffusion élastique, les collisions inélastiques, l'émission de rayonnement de freinage et l'annihilation pour les positons. Les sections efficaces utilisées par le code PENELOPE pour simuler ces différents types d'interaction sont présentées dans le Tableau 3. Des informations complémentaires sur ces mécanismes peuvent être recueillies dans Baró *et al.* (1995), Sempau *et al.* (1997), Salvat *et al.* (1996, 2001 et 2006).

Tableau 3 : Sections efficaces décrivant les interactions des électrons (ou positons) avec la matière dans le code PENELOPE.

Interaction	Sections efficaces
Diffusion élastique	Sections efficaces obtenues à partir d'un programme décrit par Salvat <i>et al.</i> (2006)
Collision inélastique	Sections efficaces différentielles de Born en utilisant le modèle de force d'oscillateur généralisé de Sternheimer-Liljequists
Rayonnement de freinage	Sections efficaces de Bethe-Heitler modifiées par Salvat et Fernández-Varea (1992)
Annihilation du positon	Sections efficaces différentielles de Heitler

Annexe B

CARACTERISTIQUES DE LA PARALLELISATION DES CODES MONTE CARLO PENELOPE ET PENFAST VIA L'INTERFACE MPI

Les deux codes PENELOPE (version 2006) et PENFAST sont parallélisés de la même manière en utilisant l'interface MPI (version mpich2-1.0.6, MPI 1997). Les deux codes parallélisés sont écrits en langage FORTRAN 77 (comme leur version standard non parallélisée), à l'exception du générateur de nombres pseudo-aléatoires et de la fonction de lecture des PSF écrits en langage C. Les codes parallélisés, fonctionnent pour un nombre N_p quelconque de processeurs avec, pour $N_p > 1$, un processeur « maître » chargé de la gestion des fichiers et N_p-1 processeurs « esclaves » dédiés au calcul par MC. Toutes les possibilités des codes standards non parallélisés ont été maintenues dans leur version parallélisée. Cette parallélisation peut être décomposée en trois parties (Tola *et al.* 2006), chacune se prêtant à une approche spécifique :

- La lecture des fichiers d'entrée ou données du problème.
- La simulation du transport des particules par MC.
- La collecte des résultats et sauvegarde des fichiers de sortie.

1. Lecture des fichiers d'entrée

Les fichiers de données sont au nombre de trois : le premier spécifiant les divers paramètres nécessaires à la simulation (FICHIER.in), le deuxième décrivant la géométrie (FICHIER.geo) et le dernier contenant les propriétés physiques et les sections efficaces d'interaction des différents matériaux (FICHIER.mat). Une description plus détaillée de ces fichiers est présente en Annexe A.

Dans la version parallélisée, chacun des processeurs parallèles lit d'une façon séquentielle (ligne par ligne) les mêmes fichiers d'entrée, en gérant son propre pointeur.

2. Simulation du transport des particules par Monte Carlo

La parallélisation du calcul MC consiste à répartir le nombre d'histoires simulées entre les différents processeurs autres que le « maître ». C'est la seule partie qui permet de réduire le temps d'un facteur proportionnel au nombre de processeurs. Les fonctions nécessaires peuvent être appelées du programme principal, qui est unique pour tous les processeurs parallèles entre lesquels il répartit la charge de travail. Chaque processeur est alors identifié par un indice et l'exécution du code est déployée en conséquence.

Par ailleurs, la simulation du transport des particules lors de chaque histoire repose sur le générateur parallèle de nombres pseudo-aléatoires capable de produire des multiples séquences indépendantes sur des machines parallèles. PENELOPE et PENFAST parallélisés sont fondés sur le générateur parallèle de nombres pseudo-aléatoires XORGENS de Brent (2006), basé sur des opérations logiques de décalage de registres avec addition d'un générateur congruentiel linéaire, dont la période est de $2^{4096}-1$ (10^{1233}). La combinaison d'un décalage de registre avec un générateur différent algorithmiquement est un moyen très efficace de supprimer toutes les corrélations résiduelles dans le décalage de registre (Press *et al.* 1996). Ce générateur possède les principales propriétés suivantes :

- Il génère des nombres pseudo-aléatoires uniformes sur $]0,1[$.
- Il génère des séries indépendantes de période suffisamment élevée sur différents processeurs.
- Il est reproductible et permet de faire des sauvegardes pour des calculs ultérieurs (moyennant le « dump »).

Il convient de distinguer deux cas, suivant qu'il s'agisse de la simulation du PSF (avec PENELOPE), ou du calcul de la dose reçue par le patient à partir du PSF et d'une géométrie voxélisée (avec PENFAST).

2.1. Simulation de l'espace des phases

La simulation du PSF est réalisée avec le code PENELOPE, en amont du traitement radiothérapeutique. Ce calcul demande plusieurs semaines sur un seul processeur. Un PSF est constitué de l'ensemble des particules qui parviennent à un détecteur, et de leur état, défini par 14 paramètres (type, énergie, position, direction, poids et des paramètres liés à l'affiliation de la particule courante par rapport à la particule primaire). Suivant qu'il s'agit d'un traitement en mode électron ou photon, le PSF comportera quelques millions à quelques centaines de

millions de particules respectivement pour obtenir une incertitude statistique acceptable (de l'ordre de 1 % (1σ) entre 50 et 100 % de la dose maximale) au niveau de la dose délivrée au patient.

Dans la version parallélisée de PENELOPE, chacun des processeurs esclave produit son propre ensemble de trajectoire de particules. Aucune communication inter-processeur n'est nécessaire au cours du calcul. Chaque processeur accumule dans un buffer des données brutes appropriées de son propre ensemble de trajectoire.

La sauvegarde des paramètres de la particule dans un PSF se fait en format binaire via MPI dans un seul fichier, accédé en écriture uniquement par le processeur « maître », qui reçoit ces paramètres par bloc des processeurs « esclaves ». La taille du bloc est fixée par l'utilisateur dans le fichier d'entrée FICHIER.in.

2.2. Calcul de la dose délivrée au patient à partir du PSF

PENFAST ne charge pas directement le PSF en mémoire, du fait de sa taille, mais il lit séquentiellement ligne par ligne les données de chaque particule source au début d'une nouvelle histoire. Dans la version parallélisée de PENFAST, seul le processeur « maître » lit le fichier PSF binaire et envoie des blocs de particules aux processeurs esclaves.

3. Collecte et sauvegarde des résultats de dose dans des fichiers de sortie

A la fin du calcul (ou à chaque « dump »), le processeur « maître » rassemble les données brutes des processeurs « esclaves ». Les calculs sur les différents processeurs parallèles sont arrêtés dès que le nombre d'histoires ou le temps imparti est atteint. Une fois le calcul terminé sur tous les processeurs « esclaves », le processeur « maître » additionne les résultats partiels, calcule les moyennes et les variances puis produit les sorties sous forme de distributions tridimensionnelles de doses absorbées dans une matrice voxélisée. Ces sorties sont ensuite sauvegardées sur fichiers au format ASCII identique à celui de la version standard non parallélisée.

Annexe C

METHODE DES MOINDRES CARRES AVEC LA CONTRAINTE DE NON-NEGATIVITE

La fonction *lsqnonneg* (Least Squares with NONNEGativity constraints, ancienne appellation *nnls* dans Lawson et Hanson, 1974) du logiciel MATLAB a été utilisée pour la reconstruction du spectre énergétique des électrons primaires d'un accélérateur linéaire. Cette fonction utilise le principe des moindres carrés avec la contrainte de non-négativité afin d'éviter d'avoir des valeurs négatives de la contribution d'une énergie. La Figure 1 présente un descriptif général de l'algorithme utilisé dans cette fonction.

Nous considérons une matrice E de dimension $(m \times n)$ et un vecteur y de dimension m . Les vecteurs w et z de dimension n présentent l'espace de travail.

Deux séries d'index \mathcal{Z} et \mathcal{U} sont définies. Les variables indexées dans la série \mathcal{Z} auront la valeur zéro. Les variables indexées dans la série \mathcal{U} seront libres de prendre des valeurs différentes de zéro. Si une variable prend une valeur non-positive, l'algorithme pourra ajuster la variable à une valeur positive ou à zéro et passer son index de \mathcal{U} à \mathcal{Z} .

A la fin de l'algorithme, le vecteur solution du problème des moindres carrés p et le vecteur « dual » w auront les caractéristiques suivantes :

$$p_j > 0 ; j \in \mathcal{U} \qquad w_j = 0 ; j \in \mathcal{U} \qquad (\text{Eq. 1})$$

$$p_j = 0 ; j \in \mathcal{Z} \qquad w_j \leq 0 ; j \in \mathcal{Z}$$

$$E_{\mathcal{U}} p = y$$

$$w = E^T (y - Ep)$$

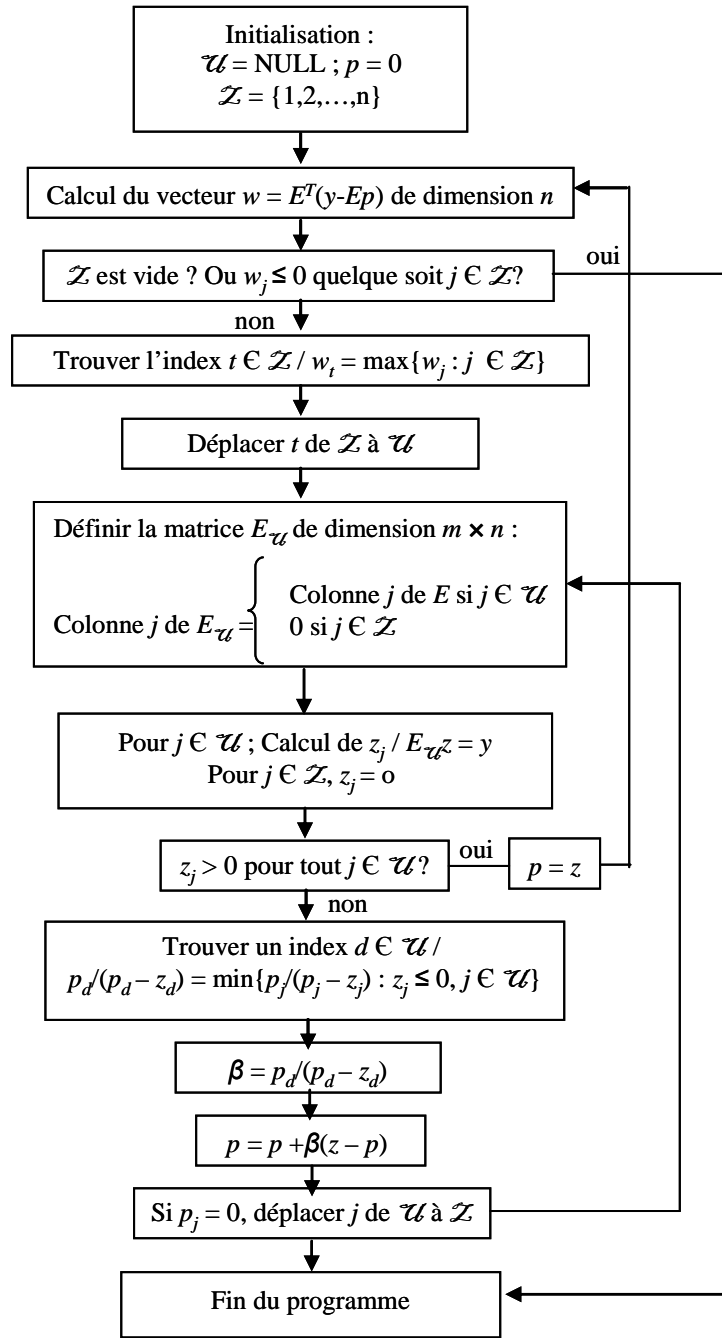


Figure 1 : Organigramme de la fonction *lsqnonneg*($E, m, n, y, p, w, z, \mathcal{U}, \mathcal{Z}$) (Lawson et Hanson 1974).

Cette fonction résout, par la méthode des moindres carrés, le problème d'optimisation $\min \|y - Ep\|^2$ soumis à la contrainte $p \geq 0$. Dans notre problème, E est la matrice des rendements en profondeur calculés, p est le vecteur de l'intensité recherchée de chaque énergie et y est le vecteur du rendement en profondeur expérimental.

La référence de Lawson et Hanson (1974) fournit plus de détails concernant cet algorithme et démontre sa convergence.

Annexe D

MODELISATION GEOMETRIQUE DE LA TETE DES ACCELERATEURS LINEAIRES

1. Modélisation géométrique de la tête de l'accélérateur Saturne 43

L'accélérateur linéaire médical Saturne 43 accélère les électrons de basse énergie émis, par effet thermoélectronique, d'un filament de tungstène afin d'atteindre des énergies comprises entre 4 MeV et 21 MeV utilisées pour le traitement de tumeurs en radiothérapie. Les électrons sont accélérés dans un guide d'onde au moyen du champ électrique d'une onde électromagnétique stationnaire de forte puissance produite par un klystron. A la sortie de la section accélératrice horizontale, les électrons subissent une déviation magnétique à 270° qui rend le faisceau vertical et focalisé en direction du patient. L'avantage de ce type de déviation est de réaliser un filtrage de l'énergie des électrons à l'aide du champ magnétique. Le faisceau d'électrons pénètre alors dans la tête d'irradiation de l'accélérateur destinée à générer des faisceaux de photons ou d'électrons utilisés pour le traitement. Le faisceau d'électrons peut frapper une cible de matériau lourd afin de produire des photons de freinage (spectre continu de rayons X d'énergie comprise entre 0 et l'énergie maximale des électrons accélérés). Au contraire, le faisceau d'électrons peut traverser une paire de diffuseurs de façon à élargir le faisceau initial.

Un faisceau de photons de 12 MV et un faisceau d'électrons de 18 MeV définissant un champ d'irradiation de 10×10 cm² à 100 cm de la source ont été modélisés avec le programme PENGOM du code PENELOPE. Les outils de visualisation GVIEW2D et GVIEW3D ont permis de vérifier la géométrie de la tête d'irradiation par rapport aux données du constructeur.

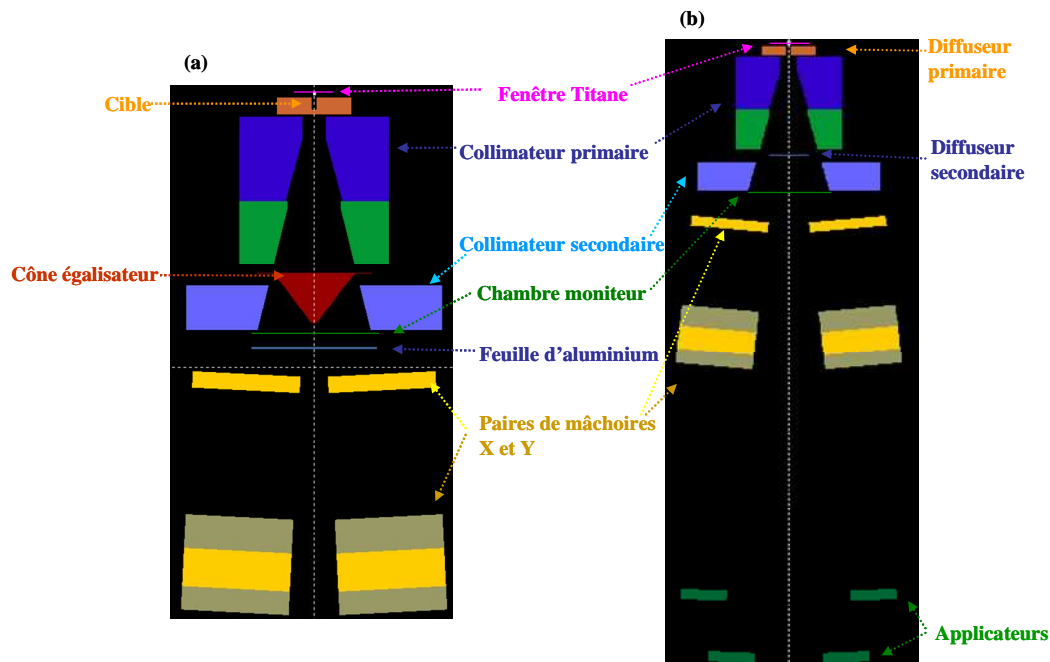


Figure 1 : Visualisation avec le logiciel GVIEW2D de la tête de l'accélérateur linéaire Saturne 43 pour (a) un faisceau de photons de 12 MV et (b) un faisceau d'électrons de 18 MeV, de champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

1.1. Faisceau de photons de 12 MV

La Figure 1a représente une vue en deux dimensions de la géométrie modélisée de la tête de l'accélérateur linéaire Saturne 43 en mode photon 12 MV. On retrouve sur cette figure les éléments suivants par ordre de traversée du faisceau :

- La fenêtre de sortie des électrons de la chambre de déviation. Elle est formée en titane et permet d'assurer le vide dans les bobines de déviation.
- La cible de 4 mm d'épaisseur. Formée d'un matériau lourd (tungstène), elle est le siège de la création des photons par rayonnement de freinage.
- Le collimateur primaire, de forme conique, qui définit le champ maximum d'irradiation.
- Le cône égalisateur qui grâce à sa forme conique homogénéise la répartition de la dose au niveau du champ d'irradiation. Cet élément a été modélisé avec 3 cônes tronqués.
- Le collimateur secondaire qui est aussi de forme conique. Il prend la limitation du faisceau définie par le collimateur primaire.
- La chambre moniteur qui est composée d'un ensemble de chambres d'ionisation (CI). Elle contrôle la dose délivrée au patient et régule les bobines de déviation du faisceau pour en assurer l'homogénéité et la symétrie.
- La feuille d'anti-rétrodiffusion qui évite la contamination de la chambre moniteur par les électrons rétrodiffusés par les mâchoires.

-
- Les deux paires de mâchoires mobiles X et Y qui délimitent la taille du champ. Elles se déplacent selon un arc de cercle de façon à assurer la focalisation du faisceau.

1.2. Faisceau d'électrons de 18 MeV

La Figure 1b représente une vue en deux dimensions de la géométrie modélisée de la tête de l'accélérateur Saturne 43 en mode électron 18 MeV. On retrouve sur cette figure les éléments suivants par ordre de traversée du faisceau :

- La fenêtre en titane.
- Le diffuseur primaire en tungstène dont le rôle principal est d'élargir le faisceau quasi monodirectionnel en sortie de la déviation magnétique.
- Le collimateur primaire.
- Le diffuseur secondaire en plomb qui homogénéise le faisceau en l'atténuant de manière dégressive en allant du centre vers les bords. Les diffuseurs primaires et secondaires doivent être d'épaisseur fine afin de limiter la contamination du faisceau par les photons de freinage.
- Le collimateur secondaire.
- La chambre moniteur.
- Les deux paires de mâchoires mobiles X et Y qui jouent le rôle de collimateur intermédiaire.
- Les applicateurs qui délimitent le champ d'irradiation. Dans cette étude, l'ouverture des mâchoires X et Y décrit une taille de champ d'irradiation de 20×20 cm² à 100 cm de la source pour assurer, après mise en place des applicateurs, la définition d'une taille de champ de 10×10 cm² à 100 cm de la source.

Les différents matériaux et alliages utilisés pour la modélisation de la tête d'irradiation (modes photon et électron) sont détaillés dans le Tableau 1.

Tableau 1 : Composition et densité des éléments constituant la tête de l'accélérateur Saturne 43.

Elément	Matériau	Composition (% massique)	Masse volumique (g/cm ³)
Fenêtre	Titane	Ti(100)	4,57
Cible / Diffuseur primaire	Tungstène	W(100)	19,30
Collimateur primaire	Denal	W(90,5) ; Ni(7) ; Cu(2,5)	16,80
	XC10	C(0,1) ; Mn(0,6) ; Fe(99,3)	7,80
Diffuseur secondaire	Plomb	Pb(100)	11,35
Cône égalisateur	Inox	Mn(2) ; Si(1) ; Ni(10) ; Cr(18) ; Fe(69)	7,80
Collimateur secondaire	Plomb	Pb(100)	11,35
Chambre moniteur	Kapton	C(69,1) ; O(20,9) ; N(7,3) ; H(2,6)	1,42
Feuille d'anti-rétrodiffusion	Aluminium	Al(100)	2,70
Mâchoires	Denal	W(90,5) ; Ni(7) ; Cu(2,5)	16,80
	Plomb	Pb(100)	11,35
Applicateurs	Acier	C(0,1) ; Si(0,7) ; Cr(18)	8,06
		Mn(1) ; Fe(71,2) ; Ni(9)	

2. Modélisation géométrique de la tête de l'accélérateur Primus

Les géométries de la tête de l'accélérateur Primus de Siemens opérant en mode photon 25 MV et en mode électron 9 MeV ont été modélisées avec le code MC PENELOPE pour le champ de référence (10×10 cm²), des petits champs (4×4 cm² en mode photon et 6×6 cm² en mode électron) et un grand champ (20×20 cm²) définis à 100 cm de la source. Les différents éléments de la tête d'irradiation ont été modélisés suivant les informations fournies par le constructeur.

2.1. Faisceau de photons de 25 MV

La Figure 2a représente une vue en trois dimensions de la géométrie modélisée de la tête de l'accélérateur linéaire d'électrons Primus en mode photon 25 MV, pour un champ 10×10 cm² défini à 100 cm de la source. On retrouve sur cette figure les éléments suivants :

- La fenêtre en titane.
- La cible formée d'une mince couche d'or. Elle est reliée à un système de refroidissement liquide géré par un simple circuit d'eau placé directement au contact de l'or.
- Le collimateur primaire est en tungstène. Il est obturé par un absorbeur en aluminium qui a pour rôle d'absorber les rayonnements de basse énergie.

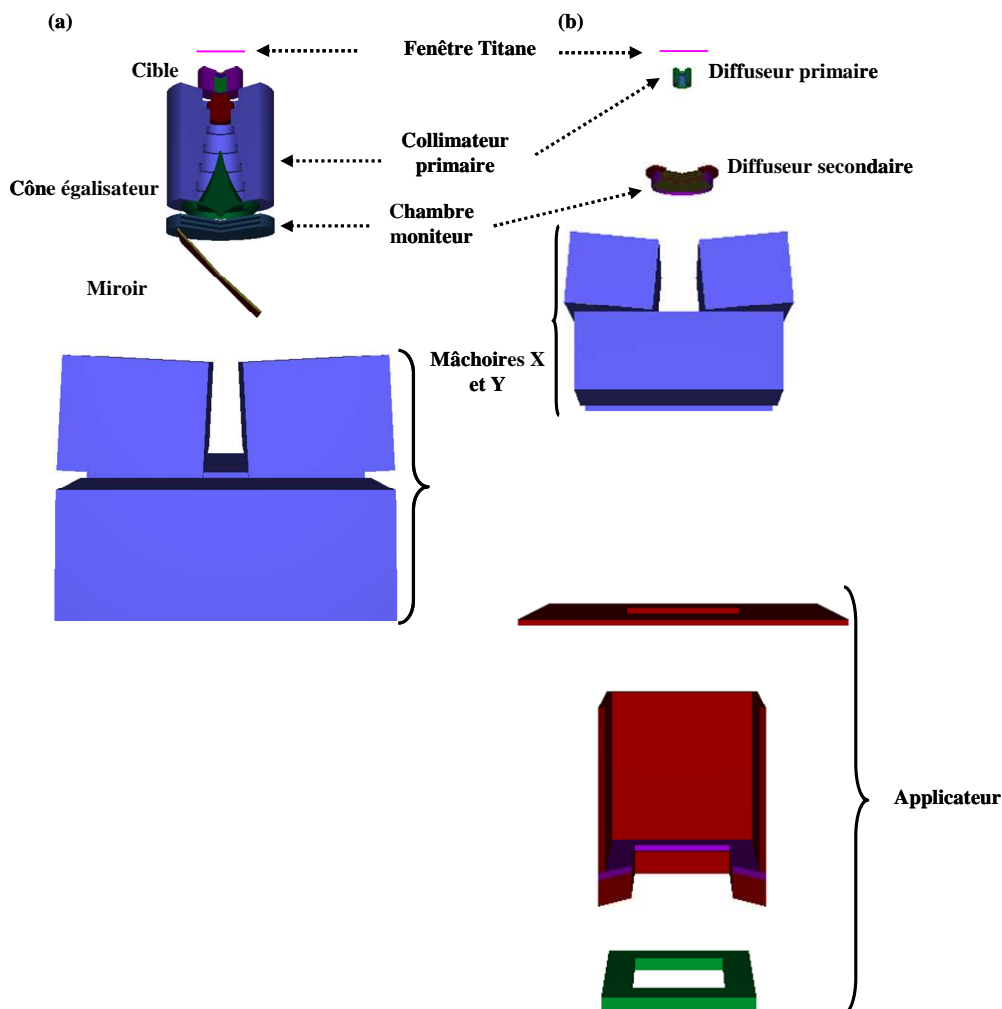


Figure 2 : Visualisation avec le logiciel GVIEW3D de la tête de l'accélérateur linéaire Primus en modes (a) photon 25 MV et (b) électron 9 MeV. Cas d'un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$ défini à 100 cm de la source.

- Le cône égalisateur est en acier inoxydable (SST 303). Ses pentes successives sont conçues de façon à ce que le profil de dose d'un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$ réalisé à 100 cm de la source et à 10 cm de profondeur soit quasiment plat.
- La chambre moniteur spécifique aux photons. Elle est multi-segmentée et faite d'alumine (Al_2O_3). Dans la modélisation, elle est considérée comme une seule couche circulaire.
- Un miroir semi-réfléchissant constitué de deux couches en aluminium recouvertes d'une couche de SiO_2 . Il permet de projeter sur la table de traitement un champ lumineux dans l'axe d'irradiation.
- La collimation secondaire constituée d'une paire de mâchoires et d'un collimateur multilames. Les mâchoires sont constituées de deux blocs parallélépipédiques de quelques centimètres d'épaisseur fabriqués en tungstène. Leur but est de limiter le champ suivant l'axe Y. Elles se déplacent selon un arc de cercle de façon à assurer la focalisation du

faisceau. Le collimateur multilames, situé en aval des mâchoires, est composé de plusieurs lames se déplaçant suivant l'axe X. Egalement en tungstène, les lames sont imbriquées les unes dans les autres de façon à limiter la fuite inter-lames. Elles permettent de réaliser des conformations de champs complexes en effectuant des mouvements indépendants selon des arcs de cercles concentriques. Dans la modélisation, le collimateur multilames a été représenté comme des blocs compacts. Les lames n'ont pas été modélisées pour des raisons de temps de calcul. Cette approximation a été justifiée par le fait que tous les champs d'irradiation étudiés étaient de formes carrés.

2.2. Faisceau d'électrons de 9 MeV

La Figure 2b représente une vue en trois dimensions de la géométrie modélisée de la tête de l'accélérateur Primus en mode électron 9 MeV, pour un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$ défini à 100 cm de la source. On retrouve sur cette figure, les éléments suivants :

- La fenêtre en titane.
- Le diffuseur primaire constitué d'une feuille en or de quelques dizaines de microns.
- Le collimateur primaire.
- Le diffuseur secondaire composé de trois couches minces d'aluminium de rayon croissant.
- La chambre moniteur spécifique aux électrons. Elle possède trois couches comportant chacune deux très minces dépôts d'or séparés par une feuille de kapton.
- La collimation intermédiaire assurée par les mâchoires et le collimateur multilames.
- L'applicateur définissant la taille du champ d'irradiation. Il est modélisé en trois parties qui collimatent successivement le faisceau pour avoir la taille de champ désirée. L'ensemble de l'applicateur est réalisé en aluminium à l'exception de la dernière partie faite d'un alliage cuivre-zinc (laiton). Un insert en cerrobend peut être glissé à la base de l'applicateur afin de définir des champs quelconques plus petits que $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

Les différents matériaux et alliages utilisés pour la modélisation de la tête d'irradiation (modes photon et électron) sont détaillés dans le Tableau 2.

Tableau 2 : Composition et densité des éléments constituant la tête de l'accélérateur Primus.

Matériau	Composition (% massique)	Masse volumique (g/cm ³)
Titane	Ti(100)	4,57
Or	Au(100)	19,32
SST 304	C(0,5) ; Mn(2) ; Si(1) Cr(19) ; Ni(9,5) ; Fe(68)	8,19
Eau	H(11,1) ; O(88,9)	1,00
Graphite	C(100)	1,70
Tungstène	W(100)	18,00
Aluminium	Al(100)	2,70
SST 303	C(0,1) ; Mn(2) ; P(0,05) ; S(0,05) Si(1) ; Cr(18) ; Ni(9) ; Fe(69,8)	8,19
Alumine	O(47) ; Al(53)	3,97
SiO ₂	O(53,2) ; Si(46,8)	2,32
Laiton	Cu(63) ; Pb(2,9) ; Fe(0,1) ; Zn(34)	8,40
Kapton	H(2,6) ; C(69,2) ; N(7,3) ; O(20,9)	1,42
Acier	Fe(98,4) ; Pb(0,3) ; S(0,3) ; Mn(1)	7,76
Cerrobend	Bi(50) ; Pb(26,7) ; Sn(13,3) ; Cd(10)	9,60

LISTE DES PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS

PERSONNELLES

Publications

Habib B, Poumarède B, Tola F, Barthe J. Evaluation of PENFAST - a fast Monte Carlo code for dose calculations in photon and electron radiotherapy treatment planning. in press (2009). Phys. Med. Eur. J. Med. Phys. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ejmp.2009.03.002>

Habib B, Poumarède B, Barthe J. Evaluation of the Monte Carlo dose calculation in a radiotherapy treatment planning system for homogeneous and heterogeneous media. À soumettre à Med. Phys.

Habib B, Poumarède B, Barthe J. Nouvelle méthode de représentation du spectre en énergie initial d'un accélérateur linéaire en vue d'une planification de traitement en radiothérapie par Monte Carlo. Proceeding, 48èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 3-5 juin 2009, Montauban, France.

Habib B, Poumarède B, Barthe J. A new method to determine the initial energy spectrum of the linear accelerator for Monte Carlo radiotherapy treatment planning. Abstract accepted in Phys. Med. Eur. J. Med. Phys. (2009)

Habib B, Poumarède B, Barthe J. Dosimetric verification of the radiotherapy treatment planning system based on the PENFAST Monte Carlo code for photon and electron dose calculations. Abstract accepted in the Health Physics Journal (2009).

Poumarède B, Habib B, Bordy JM, Tola F. The TELEDOS project: TELE-service for DOSE calculations in radiotherapy. Abstract accepted in Phys. Med. Eur. J. Med. Phys. (2009)

Tola F, Poumarède B, Habib B, Gmar M. Optimisation of Monte Carlo codes PENELOPE 2006 and PENFAST by parallelization and reduction variance implementation. Proceeding, Second European Workshop on Monte Carlo Treatment Planning, 19-21 October 2009, Cardiff, United Kingdom.

Habib B, Tola F, Bordy JM, Poumarède B. Validation of dose calculations with PENFAST (a fast Monte Carlo code for TPS in radiotherapy) using a beam energy spectrum reconstructed by a least squares method. Abstract in Med. Phys. 2008; 35(6): 2808.

Thiam CO, Breton V, Donnarieix D, Habib B, Maigne L. Validation of a dose deposited by low-energy photons using GATE/GEANT4. Phys. Med. Biol. 2008; 53: 3039-55.

Poumarède B, Habib B, Bordy JM. TELEDOS : Bulletin de validation dosimétrique. Livrable TELEDOS SP4.8 (2008).

Poumarède B, Tola F, Habib B. TELEDOS : Bulletin de validation pour code de calcul (gain en performance et en précision). Livrable TELEDOS SP2.4 (2008).

Conférences nationales et internationales

Habib B et al. Dosimetric verification of the radiotherapy treatment planning system based on the PENFAST Monte Carlo code for photon and electron dose calculations. Oral presentation at the Annual Meeting of the Health Physics Society, 12-16 July 2009, Minneapolis, USA.

Habib B et al. Nouvelle méthode de détermination du spectre en énergie initial d'un accélérateur linéaire en vue d'une planification de traitement en radiothérapie par Monte Carlo. Poster aux 48èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 3-5 juin 2009, Montauban, France.

Poumarède B, Habib B, Bordy JM, Tola F. Le projet TELEDOS : TÉLÉ-service pour le calcul de DOSe en radiothérapie. 48èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 3-5 juin 2009, Montauban, France.

Poumarède B, Habib B, Tola F, Bordy JM. TELEDOS : calcul de dose en radiothérapie, de l'accélération d'un code Monte Carlo à la validation clinique. Poster à la 4ème rencontre annuelle des technologies pour la santé, 16 octobre 2008, Commissariat à l'Energie Atomique, Grenoble, France.

Habib B et al. Validation of dose calculations with PENFAST (a fast Monte Carlo code for TPS in radiotherapy) using a beam energy spectrum reconstructed by a least squares method. Poster at the American Association of Physicists in Medicine annual meeting, 27-31 July 2008, Houston, USA.

Habib B et al. Comparaison des codes Monte Carlo PENELOPE et PENFAST (un code de calcul de dose accéléré pour les TPS en radiothérapie) avec les mesures. Présentation orale aux 47èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 4-6 juin 2008, Marseille, France.

Habib B et al. Parallélisation et validation dosimétrique des codes Monte Carlo PENELOPE et PENFAST. Présentation orale au symposium sur les Systèmes de planification des traitements par Monte Carlo : vers un nouveau paradigme en radiothérapie ?, 4 avril 2008, Institut Gustave Roussy, Villejuif, France.

Habib B et al. Optimisation et validation du code Monte Carlo PENELOPE dans le cadre du projet TELEDOS (télé-service pour le calcul de dose en radiothérapie). Poster à la 3ème rencontre annuelle des technologies pour la santé, 12 octobre 2007, Commissariat à l'Energie Atomique, Gif Sur Yvette, France.

Habib B et al. Parallélisation et validation dosimétrique du code Monte Carlo PENELOPE en vue de son intégration dans un système de planification de traitement en radiothérapie. Poster au congrès national de la Société Française de Radioprotection, 19-21 juin 2007, Reims, France. (Prix du Meilleur Poster)

Habib B et al. Le projet TELEDOS : télé-service pour le calcul de dose en radiothérapie. Présentation orale aux 46èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 30 mai-1 juin 2007, Saint Malo, France.

Habib B et al. Etudes dosimétriques des sources d'iode 125 avec GATE, optimisation des temps de calcul sur la grille EGEE. Présentation orale aux 45èmes journées scientifiques de la Société Française de Physique Médicale, 7-9 juin 2006, Lyon, France.

Enseignements

Cours de radioactivité (6h) dans le cadre de la formation des personnes compétentes en radioprotection en février et décembre 2008 à l'Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires (CEA-INSTN, Gif Sur Yvette).

Cours sur les interactions des rayonnements avec la matière (9h) dans le cadre de la formation des personnes compétentes en radioprotection en décembre 2007, octobre 2008 et juin 2009 à l'Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires (CEA-INSTN, Gif Sur Yvette).

RESUME

Des avancées relatives à la rapidité du calcul de dose par MC ont été apportées dans le cadre du projet européen MAESTRO avec le développement du nouveau code MC rapide PENFAST ainsi que dans le cadre du projet TELEDOS avec la parallélisation de ce code. Ce travail de thèse, issu de ces deux projets, porte sur l'évaluation des performances techniques et dosimétriques du code MC, indispensable avant toute utilisation en routine clinique.

Dans un premier temps, les techniques de réduction de variance incluses dans le code MC ainsi que la parallélisation du calcul ont été validées et évaluées en terme de gain en temps de calcul. La deuxième partie du travail a exposé une nouvelle méthode, rapide et précise, d'ajustement du spectre en énergie initial de l'accélérateur, indispensable au calcul de la dose par MC. La suite de l'étude a été consacrée à l'évaluation du calcul de dose par le code MC rapide PENFAST en conditions métrologiques et cliniques.

Les résultats ont montré la capacité du code MC à calculer rapidement une dose précise, en modes photon et électron, même en condition de manque d'équilibre électronique. Cette étude a toutefois révélé une imprécision du TPS-MC dans la conversion de l'image TDM en géométrie voxélisée utilisée pour le calcul de dose. La qualité de cette voxélisation pourra être améliorée moyennant un logiciel automatique de correction des artefacts dans l'image TDM ainsi qu'en ajoutant des matériaux supplémentaires dans la base de données du code.

Mots clés : système de planification de traitement, dosimétrie, code MC PENELOPE, code MC PENFAST, accélérateur linéaire, spectre en énergie, électrons primaires, hétérogénéité, film radiographique, conversion image TDM – géométrie voxélisée.

ABSTRACT

Improvements relative to the MC dose calculation speed have been made within the European project MAESTRO by the development of the fast MC code PENFAST and within the TELEDOS project by the parallelization of this code. This PhD work, based on these two projects, focuses on the evaluation of the technical and dosimetric performances of the MC code. These issues are crucial before the use of the MC code in clinical applications.

First, variance reduction techniques included in the MC code as well as the parallelization of the calculation have been validated and evaluated in terms of gain in the computing time. The second part of this work has exposed a new, fast and accurate method to determine the initial energy spectrum of the accelerator. This spectrum is required for the MC dose calculation. Afterwards, dose calculations with the fast MC code PENFAST have been evaluated under metrological and clinical conditions.

The results showed the ability of the MC code to quickly calculate an accurate dose in both photon and electron modes, even in electronic disequilibrium situations. However, this study revealed an uncertainty, in the TPS-MC, in the conversion of the CT image to voxelized geometry which is used for MC dose calculation. The quality of this voxelization may be improved through an artefacts correction software and by including additional materials in the database of the code.

Key words: treatment planning system, dosimetry, PENELOPE MC code, PENFAST MC code, linear accelerator, energy spectrum, primary electrons, heterogeneity, radiographic film, CT image to voxelised geometry conversion.

DISCIPLINE : Physique – Radiophysique et Imagerie Médicales.

CEA, LIST, Département des Technologies du Capteur et du Signal, F-91191 Gif-sur-Yvette, France.