

Preparando arquivos de entrada para cálculos de frações absorvidas em modelos tomográficos (modelos de voxels) com o código MCNP

P. H. R. Peixoto^{1,2}; H. Yoriyaz³; F. R. A. Lima⁴

¹ Departamento de Energia Nuclear, Universidade Federal de Pernambuco, 50740-540, Recife-PE, Brasil

² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Petrolina-PE, Brasil

³ Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo-SP, Brasil

⁴ Centro Regional de Ciências Nucleares – CNEN, Recife-PE, Brasil

phrpeixoto@yahoo.com.br

(Recebido em 09 de agosto de 2009; aceito em 21 de dezembro de 2009)

O objetivo deste trabalho é descrever em detalhes a estrutura de um arquivo de entrada para cálculos de frações absorvidas em modelos tomográficos com o código MCNP. Um modelo tomográfico muito simples foi desenvolvido e, em seguida, um arquivo de entrada do MCNP para cálculos de frações absorvidas com esse modelo foi criado. Uma discussão detalhada do arquivo de entrada criado é realizada e os resultados principais da simulação são apresentados. A partir das informações fornecidas, um usuário do MCNP sem nenhuma experiência prévia com simulações envolvendo modelos tomográficos estará apto a acoplar um modelo desse tipo ao código e a realizar cálculos de frações absorvidas com o mesmo.

Palavras-chave: código MCNP, modelos tomográficos, fração absorvida, medicina nuclear.

The aim of this work is to describe the structure of a MCNP input file for absorbed fraction (AF) calculations in tomographic models. A very simple tomographic model was developed and a MCNP input file for AF calculations with this model was build. A detailed discussion of the created input file is made, and the main results of the simulation are presented. Starting from the given information, a MCNP user with no previous experience with tomographic models can now couple such a model to the MCNP and perform his/her own AF calculations.

Keywords: MCNP code, voxel phantoms, absorbed fraction, nuclear medicine.

1. INTRODUÇÃO

Uma parte considerável dos avanços alcançados no campo da Radiologia nas últimas décadas deve-se ao desenvolvimento de códigos computacionais que fazem uso de técnicas Monte Carlo para simular o transporte de radiações ionizantes na matéria, e à aplicação desses códigos para a realização de cálculos de interesse em Radiologia Diagnóstica, Radioterapia e Medicina Nuclear [1,2]. Em Medicina Nuclear, esses cálculos usualmente seguem o formalismo MIRD [3], segundo o qual a dose absorvida média $D(r_k)$ em um órgão ou região alvo particular r_k é calculada a partir da relação

$$D(r_k) = \sum_h \tilde{A}(r_h) S(r_k \leftarrow r_h),$$

em que $\tilde{A}(r_h)$ é a atividade acumulada (o número total de desintegrações no intervalo de tempo relevante) no órgão ou região fonte r_h e $S(r_k \leftarrow r_h)$ é a dose absorvida média na região alvo por desintegração radioativa na região fonte r_h . O fator S é dado por

$$S(r_k \leftarrow r_h) = \frac{1}{m(r_k)} \sum_i n_i(r_h) E_i(r_h) \phi_i(r_k \leftarrow r_h),$$

em que $m(r_k)$ é a massa da região alvo, $n_i(r_h)$ é o número médio de partículas do i -ésimo tipo emitidas (na região fonte r_h) por desintegração radioativa, $E_i(r_h)$ é a energia de tal partícula e $\phi_i(r_k \leftarrow r_h)$ é a fração dessa energia que é absorvida pela região alvo. As frações absorvidas $\phi_i(r_k \leftarrow r_h)$ são estimadas via simulação Monte Carlo, enquanto $n_i(r_h)$ e $E_i(r_h)$ são obtidos do

espectro de emissão do radionuclídeo na região fonte r_h . Já o valor de $m(r_k)$ depende do modelo computacional utilizado para o organismo sob consideração, que pode ser um modelo estilizado (definido a partir de combinações de formas geométricas simples) ou um modelo tomográfico (construído pela varredura do organismo por tomografia computadorizada ou por ressonância magnética, possibilitando representações anatômicas bem mais realistas do que as obtidas com o uso de modelos estilizados).

O objetivo deste artigo é descrever em detalhes a estrutura de um arquivo de entrada para cálculos de frações absorvidas em modelos tomográficos com o código MCNP (Monte Carlo N-Particle Transport Code System) [4]. Um conhecimento elemental da estrutura de um arquivo de entrada do MCNP, conforme apresentado no primeiro capítulo do manual para a versão 4C [4], é aqui requerido.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

O modelo tomográfico construído neste trabalho, apresentado na Fig. 1, é propositalmente simples. Tem apenas 24 voxels (elementos de volume), mas possui todas as características de modelos mais complexos, como aqueles usados para a modelagem de organismos humanos (que usualmente têm da ordem de alguns milhões de voxels, incluindo voxels de ar). Os voxels em cinza escuro são voxels de tecido pulmonar, aqueles em cinza claro são voxels de tecido mole e os voxels em branco são de uma mistura de osso e medula. Para esses três tipos de voxels serão usados os números identificadores (IDs) 10, 15 e 20, respectivamente.

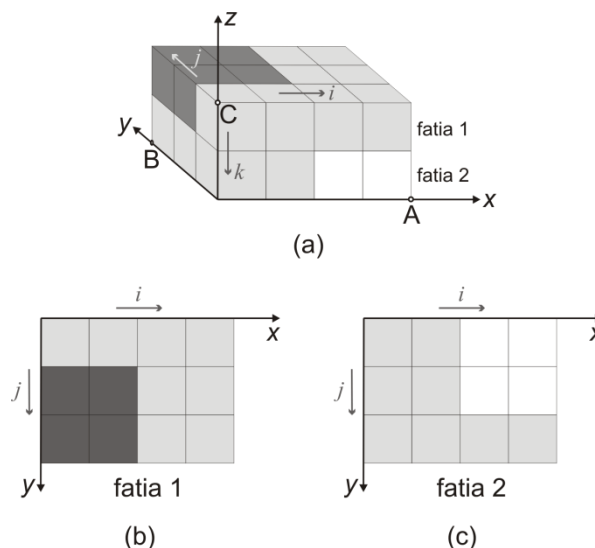


Figura 1: Modelo tomográfico com 3 tipos de voxels - pulmão (cinza escuro), tecido mole (cinza claro) e mistura de osso e medula (branco). ($x_A = 4 \times 1,1\text{cm} = 4,4\text{cm}$, $y_B = 3 \times 1,1\text{cm} = 3,3\text{cm}$, $z_C = 2 \times 1,2\text{cm} = 2,4\text{cm}$.)

A seguir é apresentado um arquivo de entrada do MCNP para cálculos de frações absorvidas com o modelo tomográfico acima (a coluna à esquerda, com os números das linhas, não faz parte do arquivo).

O arquivo de entrada

```

1- FAs para modelo tomográfico. Fonte = pulmões. E=0,4 MeV (elétrons).
2- C
3- C CARTÕES DE CÉLULAS (início)
4- C
5- 100 0 1 -2 3 -4 5 -6 FILL=9999 IMP:P,E=1 $ célula que contém o modelo
6- 200 0 -20 1 -40 3 50 -6 U=9999 LAT=1 IMP:P,E=1
7- FILL = 0:3 0:2 0:1
8- 15 3R 10 1R 15 1R 10 1R 15 3R 20 1R 15 1R 20 1R 15 3R
9- 300 0 #100 IMP:P,E=0
10- 10 10 -0.26 -20 1 -40 3 50 -6 U=10 IMP:P,E=1 $ voxel de pulmão
11- 11 0 #10 U=10 IMP:P,E=1
12- 15 LIKE 10 BUT MAT=15 RHO=-1.03 U=15 $ voxel de tecido mole

```

```

13- 16 0 #15 U=15 IMP:P,E=1
14- 20 LIKE 10 BUT MAT=20 RHO=-1.40 U=20          $ voxel de esqueleto
15- 21 0 #20 U=20 IMP:P,E=1
16- C
17- C CARTÕES DE CÉLULAS (fim)
18-
19- C CARTÕES DE SUPERFÍCIES (início)
20- C
21- 1 PX 0          $ superficies da célula que contém o modelo - início
22- 2 PX 4.4
23- 3 PY 0
24- 4 PY 3.3
25- 5 PZ 0
26- 6 PZ 2.4      $ superficies da célula que contém o modelo - fim
27- 20 PX 1.1    $ fronteira x da célula (0,0,0) da rede
28- 40 PY 1.1    $ fronteira y da célula (0,0,0) da rede
29- 50 PZ 1.2    $ fronteira z da célula (0,0,0) da rede
30- C
31- C CARTÕES DE SUPERFÍCIES (fim)
32-
33- C CARTÕES DE DADOS (início)
34- C
35- MODE P E
36- C
37- C Cartões de Fontes (início)
38- C
39- SDEF PAR=3 ERG=0.4 CEL=d1 X=d2 Y=d3 Z=d4
40- SI1 L
41-          100:200(0 1 0):10  100:200(1 1 0):10
42-          100:200(0 2 0):10  100:200(1 2 0):10
43- SP1 1 3R
44- SI2 H 0 1.1
45- SP2 0 1
46- SI3 H 0 1.1
47- SP3 0 1
48- SI4 H 1.2 2.4
49- SP4 0 1
50- C
51- C Cartões de Fonte (fim)
52- C
53- C Cartões de Contas (início)
54- C
55- *F8:P,E (10<200) $ conta para voxels de pulmão
56- *F18:P,E (15<200) $ conta para voxels de tecido mole
57- *F28:P,E (20<200) $ conta para voxels de esqueleto
58- C
59- C Cartões de Contas (fim)
60- C
61- C Cartões de Materiais (início)
62- C
63- M10 1000 -10.3 6000 -10.5 7000 -3.1 8000 -74.9
64-          11000 -0.2 15000 -0.2 16000 -0.3 17000 -0.3 19000 -0.2
65-          $ pulmões
66- M15 1000 -10.5 6000 -25.6 7000 -2.7 8000 -60.2
67-          11000 -0.1 15000 -0.2 16000 -0.3 17000 -0.2 19000 -0.2
68-          $ tecido mole
69- M20 1000 -7.3 6000 -24.5 7000 -3.1 8000 -47.9
70-          11000 -0.3 15000 -5.1 16000 -0.2 17000 -0.1 19000 -0.2
71-          20000 -10.2 12000 -0.1          $ esqueleto
72- C
73- C Cartões de Materiais (fim)
74- C
75- NPS 2400000
76- C
77- C CARTÕES DE DADOS (fim)
78-

```

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A primeira linha do arquivo de entrada contém o título do problema.

O primeiro cartão de célula, na linha 5, define a célula que contém o modelo: um paralelepípedo de dimensões 4,4 cm × 3,3 cm × 2,4 cm. A instrução `FILL=9999` especifica que a célula 100 é preenchida com o universo 9999.

O segundo cartão de célula (linha 6) define, através da instrução `LAT=1`, uma rede constituída de hexaedros, sendo cada hexaedro um voxel do modelo. A instrução `U=9999` especifica que todas as células da rede pertencem ao universo 9999. Com isto, o MCNP “sabe” que o limite da rede é a célula 100 e, portanto, a geometria de apenas uma das células desta rede – a célula (0,0,0) – precisa ser especificada, o que é feito no trecho “-20 1 -40 3 50 -6” da linha 6. A célula (0,0,0) da rede é o voxel na Fig. 1(a) que tem o ponto C como um de seus vértices (esta foi uma escolha dos autores). A ordem em que os rótulos de superfície aparecem em “-20 1 -40 3 50 -6” especifica a direção e o sentido em que os índices i, j, k das células (i, j, k) da rede devem variar: é definido no MCNP que além (para fora da célula (0,0,0)) da primeira superfície listada (20) está a célula (1,0,0), além da segunda superfície listada (1) está a célula (-1,0,0), além da terceira superfície (40) está a célula (0,1,0), além da quarta superfície (3) está a célula (0, -1,0), além da quinta superfície (50) está a célula (0,0,1), e além da sexta superfície (6) está a célula (0,0, -1). Logo, com a ordem escolhida para os rótulos de superfície em “-20 1 -40 3 50 -6”, indicada na Fig. 2, os sentidos de variação dos índices i, j e k das células (i, j, k) da rede são aqueles indicados na Fig. 1(a).

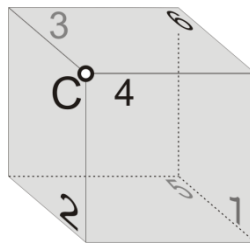


Figura 2: Ordem em que os rótulos das superfícies que limitam a célula (0,0,0) da rede aparecem no cartão que define a rede.

Os cartões de células nas linhas 7 e 8 são uma continuação do cartão na linha 6 (o MCNP interpreta uma linha com as primeiras cinco colunas em branco como uma continuação da linha anterior). O cartão `FILL = 0:3 0:2 0:1` define a faixa de variação dos três índices das células da rede: $0 \leq i \leq 3$, $0 \leq j \leq 2$ e $0 \leq k \leq 1$. No cartão subsequente estão especificados os números de universo (correspondentes aos IDs dos diferentes tipos de voxels que constituem o modelo) com os quais as células da rede devem ser preenchidas, seguindo a ordem $i \rightarrow j \rightarrow k$, ou seja, o primeiro índice a variar é o índice i , o segundo é o j e o terceiro é o k . É importante ficar claro que essa ordem de preenchimento das células da rede com universos está determinada no código fonte, e não pode ser alterada pelo usuário. Porém, como já foi dito, este pode modificar as direções e os sentidos de variação dos índices i, j, k das células (i, j, k) da rede mudando a ordem em que os rótulos das superfícies que limitam a célula (0,0,0) aparecem no cartão que define a rede. Na linha 8 foi usado um interessante recurso do MCNP, útil para reduzir o tamanho do arquivo de entrada, principalmente quando o número de voxels do modelo é muito grande: `nR` significa a repetição, por n vezes, da entrada imediatamente precedente no cartão; por exemplo, `15 3R` é o mesmo que `15 15 15 15`.

A célula 300, definida na linha 9, é a região exterior à célula 100, e tem importância nula.

As células 10, 15 e 20, definidas respectivamente nas linhas 10, 12 e 14, especificam os diferentes tipos de voxels que constituem o modelo. Por conveniência, os rótulos dessas células, bem como os rótulos dos materiais nas mesmas, foram escolhidos iguais aos números de universo correspondentes. No cartão que define a célula 10, a instrução `U=10` informa ao MCNP que essa célula pertence ao universo 10; portanto, ela está presente em todos os elementos da rede preenchidos com o universo 10. A instrução `IMP:P,E=1`, na linha 10, atribui a importância 1 à célula 10. Uma importância em uma célula que está em um universo é interpretada pelo MCNP como um multiplicador da importância da célula preenchida com esse universo. Como todas as importâncias utilizadas no arquivo de entrada apresentado são iguais a 1, os produtos decorrentes também são iguais a 1 e, dessa forma, nenhuma região da geometria é privilegiada na simulação do transporte de partículas. As células 15 e 20 foram definidas com

o auxílio da construção “ m LIKE n BUT *lista*”, que informa ao MCNP que a célula m é em tudo igual à célula n , exceto pela lista de modificações expressas após “BUT”.

As células 11, 16 e 21 foram criadas por razões puramente técnicas, e não correspondem a qualquer parte do modelo. Considere, por exemplo, a célula 11. Trata-se de uma célula pertencente ao universo 10 ($U=10$) e exterior à célula 10 (#10). Porém, como a célula 10 já ocupa completamente o espaço preenchido com o universo 10, a célula 11 não ocupa qualquer espaço real na geometria, o mesmo ocorrendo com as células 16 e 21 em relação às células 15 e 20, respectivamente. Ocorre que, sem os cartões que definem as células 11, 16 e 21, o PLOT (recurso gráfico do MCNP) exibe linhas tracejadas em toda a rede (que usualmente indicam que o espaço adjunto está imprópriamente definido), mas os resultados da simulação não são alterados. Uma alternativa à criação das células 11, 16 e 21 é substituir o trecho “-20 1 -40 3 50 -6” no cartão que define a célula 10 por “-20 11 -40 31 50 -61” e acrescentar ao arquivo de entrada os cartões de superfície 11 PX -0.01, 31 PY -0.01 e 61 PZ 2.41 (compare com os cartões que definem as superfícies 1, 3 e 6), evitando-se assim que as superfícies 1, 3 e 6, usadas na definição da rede (célula 200) e da célula 100, sejam também usadas na definição das células pertencentes à rede (células 10, 15 e 20).

O primeiro cartão de fonte (na linha 39) define uma fonte de elétrons de energia 0,4 MeV por partícula, presente nas células determinadas pelas distribuições de número 1 e nas coordenadas cartesianas x, y, z determinadas pelas distribuições de número 2, 3 e 4, respectivamente. Essas distribuições são especificadas nos demais cartões de fonte, havendo duas delas para cada número de distribuição: uma para os possíveis valores que a variável de fonte pode assumir e outra para as probabilidades correspondentes, definindo-se, assim, uma função distribuição de probabilidade. As distribuições do primeiro tipo são informadas nos cartões “SI” e as do segundo tipo nos cartões “SP”.

No cartão SI1 L, o parâmetro L informa ao MCNP que as entradas seguintes, nas linhas 41 e 42 (que são uma continuação desse cartão), devem ser interpretadas como dados discretos. Essas entradas constituem a distribuição das células da rede que contêm a fonte de radiação – no caso, os voxels de pulmão. Por exemplo, a primeira entrada, “100:200(0 1 0):10”, especifica que uma dessas células é a de rótulo 10 (voxel de pulmão) que encontra-se na coluna 0, linha 1 e fatia 0 da rede 200, que, por sua vez, pertence ao universo que preenche a célula 100. As demais entradas só se distinguem da primeira pelos valores informados para coluna, linha e fatia. As entradas no cartão SP1 1 3R, ou seja, o número 1 repetido por 3 vezes, são (exceto por um fator de normalização) probabilidades associadas às entradas que seguem o cartão SI1 L. Logo, todos os quatro voxels de pulmão têm igual chance de serem sorteados para a geração de cada partícula emitida pela fonte. (Para fontes de radiação não homogêneas, as probabilidades informadas no cartão SP1 seriam proporcionais às atividades nos voxels.)

Os cartões SI2 H 0 1.1 e SP2 0 1 definem uma função distribuição de probabilidade para a variável de fonte X . O parâmetro H informa ao MCNP que as entradas numéricas 0 e 1.1 no cartão são valores limite, ou seja, que as ocorrências da variável aleatória X estarão entre 0 e 1,1 cm. É uma exigência do MCNP que quando a opção H é usada em um cartão SI, a primeira entrada numérica no cartão SP correspondente deve ser 0 (zero); as entradas seguintes são probabilidades (exceto por um fator de normalização). Os cartões SI e SP nas linhas 46 e 47 definem uma função distribuição de probabilidade para a variável de fonte Y , e os cartões SI e SP nas linhas 48 e 49 fazem o mesmo para a variável de fonte Z . As entradas numéricas nos cartões SI2, SI3 e SI4 são para a célula (0,0,0) da rede; porém, a localização do ponto em que a partícula de radiação é gerada depende também de qual célula da rede é sorteada em cada história.

O primeiro cartão de conta (na linha 55) informa ao MCNP que devem ser computadas deposições de energia (conta tipo “*F8”) por fótons e elétrons em todas as células de rótulo 10 da rede 200, que constituem os voxels de pulmão. Os outros dois cartões de conta levam ao mesmo tipo de cômputo para as outras regiões do modelo.

Os cartões de materiais nas linhas 63 a 68 foram construídos com base nas composições apresentadas na publicação número 46 da ICRU [5] para pulmões (*lung - adult - healthy - inflated*) e tecido mole (*average soft tissue - adult - male*). Nos cartões de material nas linhas

69 a 71 foi adotada a composição da mistura de osso e medula usada por Cristy and Eckerman [6].

Dois milhões e quatrocentas mil histórias foram simuladas, utilizando-se a versão 4C do MCNP, em aproximadamente 110 minutos de computação em um Pentium IV com 2,8 GHz e 1 GB de memória RAM. Os valores estimados para a deposição de energia e para o erro relativo foram, respectivamente, $3,1233 \times 10^{-1}$ MeV e 0,0003 para pulmões, $4,0995 \times 10^{-2}$ MeV e 0,0016 para tecido mole, e $7,8414 \times 10^{-5}$ MeV e 0,0333 para esqueleto. Como os valores de energia depositada fornecidos pelo MCNP estão normalizados pelo número de histórias (ou seja, pelo número de partículas geradas pela fonte de radiação), para obter os valores das frações absorvidas basta dividir os valores anteriores pela energia inicial da partícula gerada, no caso, 0,4 MeV. Os resultados para pulmões, tecido mole e esqueleto são, respectivamente, $7,81 \times 10^{-1}$, $1,02 \times 10^{-1}$ e $1,96 \times 10^{-4}$.

4. CONCLUSÃO

A partir das informações fornecidas neste artigo, um usuário do MCNP sem nenhuma experiência prévia com simulações envolvendo modelos tomográficos estará apto a acoplar um modelo desse tipo ao código e a realizar cálculos de frações absorvidas com o mesmo.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro parcial do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Brasil. PHRP agradece ao CNPq pela bolsa de doutorado concedida.

-
1. ANDREO, P. Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Physics in Medicine and Biology* 36:861-920 (1991).
 2. ROGERS, D.W.O. Monte Carlo techniques in radiotherapy. *Physics in Canada* 58:63-70 (2002).
 3. LOEVINGER, R.; BUDINGER, T.F.; WATSON, E.E. MIRD primer for absorbed dose calculations revised. The Society of Nuclear Medicine, New York, NY, USA, 1991.
 4. BRIESMEISTER, J.F. MCNP: A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C. Los Alamos National Laboratory, 2000.
 5. International Commission on Radiation Units and Measurements. Photon, Electron, Proton and Neutron Interaction Data for Body Tissues. ICRU Report 46. Bethesda: ICRU, 1992.
 6. CRISTY, M.; ECKERMAN, K.F. Specific Absorbed Fractions of Energy at Various Ages from Internal Photon Sources. Report ORNL/TM-8381 V1-V7. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn., USA, 1987.