

# TP 1: Parcours des protons dans la matière

Daniel Maneval (daniel.maneval.1@ulaval.ca)

Date de remise: 16 février 2018

---

PHY-3500 – Physique numérique (H18)

Professeur : Philippe Després

---

## Objectif

Déterminer la portée des protons dans matière par des méthodes d'intégration numérique. Se familiariser avec la protonthérapie.

## Introduction

La radiothérapie externe par faisceaux de rayons X, d'électrons ou de hadrons a pour but de détruire des cellules pathologiques (cancer par exemple) tout en épargnant les tissus sains environnants. L'éradication des cellules tumorales est effectuée par des dépôts d'énergies élevés lors du passage des photons/électrons/hadrons dans la matière (le corps). Pour effectuer des traitements optimaux, il convient d'adapter les faisceaux à la tumeur (forme, profondeur) pour administrer la dose prescrite à la structure cible tout en préservant au maximum les tissus sains. La balistique doit être adéquate et optimisée au cas clinique à traiter et le physicien médical est le garant de la dose administrée aux volumes cibles et aux organes à risque. Le physicien médical est en quelque sorte le pharmacien de la radiation, étant responsable de son dosage.

La protonthérapie est une technique avancée de radiothérapie externe qui utilise des faisceaux de protons à des fins thérapeutiques. Elle est utilisée dans quelques dizaines de centres à travers le monde<sup>1</sup>. TRIUMF<sup>2</sup> à Vancouver est le centre de référence au Canada en protonthérapie. Ce centre est en mesure de traiter des tumeurs peu profondes car la ligne de faisceau médicale permet des énergies de protons relativement faibles. Néanmoins, cette technologie est très efficace pour traiter certains mélanomes oculaires car les protons ont l'avantage de mieux préserver les tissus environnants, grâce à une balistique de traitement optimale. Ainsi, les patients peuvent être soignés sans que le nerf optique reçoive une dose de rayonnement trop grande, ce qui pourrait causer la cécité.

---

1. <http://www.ptcog.ch/>

2. <http://www.triumf.ca/proton-therapy>

On comprend qu'il est vital de pouvoir prédire et planifier la dose reçue par le patient. Dans ce contexte, la détermination de la portée des protons dans la matière en est le premier pas.

## Pouvoir d'arrêt collisionnel des protons

Le formalisme associé au pouvoir d'arrêt collisionnel (ou électronique) fut pour la première fois énoncé par Bethe en 1933 suite à un développement perturbatif en mécanique quantique sous l'approximation de Born au premier ordre. Des développements additionnels ont été réalisés par Barkas et Bloch afin de tenir compte des limites de cette approximation au-delà du premier ordre. Ces termes d'ordre supérieur deviennent significatifs pour des ions de faible vitesse. Le pouvoir d'arrêt collisionnel massique s'exprime par

$$\frac{S_{col}}{\rho} = - \left( \frac{dT}{\rho dx} \right)_{col} = NZ \int_0^{T_e^{max}} T' \left( \frac{d\sigma}{dT'} \right)_{col} dT', \quad (1)$$

où

- $\frac{d\sigma}{dT}$  est la section efficace différentielle pour les collisions inélastiques résultant d'une énergie transférée  $T'$ ,
- $N$  est le nombre d'atomes par gramme,
- $T'$  est l'énergie transférée à l'électron de l'atome,
- $T_e^{max}$  est l'énergie maximale transférable à un électron par le proton :

$$T_e^{max} = \frac{2m_e c^2 (\gamma^2 - 1)}{1 + 2\gamma \frac{m_e}{m_p} + \left( \frac{m_e}{m_p} \right)^2} \quad (2)$$

avec  $\gamma$  représentant le facteur de Lorentz,  $m_p$  et  $m_e$  étant respectivement les énergies de masse du proton et de l'électron.

Avec la correction du modèle en couches, d'effet de la polarisation et des corrections d'ordres supérieurs en  $Z$ , on obtient le pouvoir d'arrêt collisionnel pour les protons :

$$- \left( \frac{dT}{dx} \right)_{col} = 2\pi r_e^2 m_e c^2 n_e \frac{Z^2}{\beta^2} \left[ \ln \left( \frac{2m_e c^2 (\gamma^2 - 1) T_e^{max}}{I^2} \right) - 2\beta^2 - \delta - 2\frac{C}{Z} + 2ZL_1 + 2Z^2L_2 \right], \quad (3)$$

avec

- $r_e$  le rayon classique de l'électron,
- $n_e$  la densité électronique du matériau,
- $Z$  la charge de la particule ( $Z = 1$  pour les protons),
- $I$  l'énergie moyenne d'excitation du matériau, accessible sur [1],
- $\beta$  et  $\gamma$  les facteurs de Lorentz,
- $\delta$  un terme considérant les effets de la polarisation,
- $2\frac{C}{Z}$  un terme corrigeant des effets du modèle en couches du cortège électronique atomique,
- $ZL_1$  la correction de Barkas, souvent nommée d'ordre 1 en  $Z$  mais, qui en réalité, induit une dépendance en  $Z^3$ ,
- $Z^2L_2$  la correction de Bloch, nommée d'ordre 2 en  $Z$  d'où une dépendance en  $Z^4$ .

Il est d'usage de négliger les termes correctifs **pour les protons de plus de 3 MeV** en protonthérapie, ce qui mène à

$$S_{col}(T) = 2\pi r_e^2 m_e c^2 n_e \frac{1}{\beta^2} \left[ \ln \left( \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 T_e^{max}}{I^2} \right) - 2\beta^2 \right]. \quad (4)$$

## Questions

1. Une recherche rapide vous permettra de trouver la gamme d'énergie cinétique ( $T$ ) des protons utilisés en protonthérapie. Quelle est typiquement la plus grande énergie utilisée dans les centres de protonthérapie ? Exprimez le facteur de Lorentz  $\gamma$  en fonction de  $T$ . Quelle relation relie  $\beta$  et  $\gamma$  ?
2. Exprimez la densité électronique d'un milieu en fonction de sa composition atomique et de sa masse volumique  $\rho$ , et calculez les densités électroniques de l'eau et de l'os cortical (définition de l'ICRU). On s'appuiera sur les données du NIST [1] (voir aussi le site web PSTAR plus bas). Avec Python et en utilisant `matplotlib`, tracez les courbes des pouvoirs d'arrêt collisionnel pour ces milieux. On utilisera une échelle logarithmique en abscisse. Vous trouverez aussi les énergies moyennes d'excitation  $I$  pour différents matériaux sur le site du NIST.

## Portée des protons dans la matière

L'approximation d'une décélération continue (CSDA) du proton dans la matière permet de calculer leur portée dans le milieu considéré. Le taux de perte d'énergie le long de la trace du proton est supposé être égal au pouvoir d'arrêt total (collisionnel (électronique) + radiatif + nucléaire). Les fluctuations de perte d'énergie sont ici négligées. La portée par CSDA ( $R_{CSDA}$ ) est obtenue en intégrant l'inverse du pouvoir d'arrêt total par rapport à l'énergie :

$$R_{CSDA} = \int_0^{T_i} \frac{dT'}{\frac{S_{col}}{\rho}}, \quad (5)$$

3. Déterminer l'homogénéité dimensionnelle de  $R_{CSDA}$ .
4. Justifiez que pour les protons le pouvoir d'arrêt total est bien approximé par le pouvoir d'arrêt collisionnel aux énergies de la protonthérapie. Aide : prendre l'exemple de l'eau et appuyez-vous sur PSTAR du NIST [1]<sup>3</sup>.

## Détermination de $R_{CSDA}$ : intégration numérique

Les sections suivantes s'appuient sur le chapitre 5 du livre Computational Physics de M. Newman [2].

5. Justifiez la nécessité d'employer une méthode numérique pour calculer la portée des protons.
6. Implémenter un algorithme adaptatif utilisant la méthode des trapèzes qui déterminera la portée  $R_{CSDA}$  d'un proton, à une précision valant  $10^{-9}$  cm, calculée dans les limites de validité définies par l'équation (4). Évaluez l'erreur d'approximation de façon pratique. Calculez la portée en unités de longueur pour l'eau ( $\rho = 1$  g/cm<sup>3</sup>) et l'os cortical ( $\rho = 1.85$  g/cm<sup>3</sup>).

---

3. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/PSTAR.html>

7. Établir l'expression analytique de la dérivée du pouvoir d'arrêt en fonction de  $T$  et la tracer avec `matplotlib`. On utilisera une échelle logarithme en abscisse. Aide : Exprimez le pouvoir d'arrêt en fonction de  $\gamma$  et utiliser le théorème de dérivation des fonctions composées. Utilisez aussi les définitions suivantes pour simplifier la notation :

$$T_e^{max} = \frac{a(\gamma^2 - 1)}{b + c\gamma}, \quad \text{avec } a = 2m_e, \quad b = 1 + \left(\frac{m_e}{m_p}\right)^2 \quad \text{et} \quad c = \frac{m_e}{m_p}. \quad (6)$$

et

$$U = 2\pi r_e^2 m_e c^2 n_e$$

$$k = \frac{a^2}{I^2} \quad (7)$$

8. En déduire la valeur de l'erreur d'approximation faite par l'intégration avec la méthode des trapèzes et la comparer avec l'erreur pratique calculée plus tôt.

## Optimisation

Supposons maintenant que l'on cherche à réduire au maximum le temps de calcul, disons pour évaluer en temps quasi-réel la portée de chaque proton individuel émanant de l'accélérateur et dont on connaîtrait précisément l'énergie. Ces protons ont une distribution en énergie pouvant être approximée par une gaussienne ayant une valeur moyenne de 240 MeV et un écart-type de 3 MeV.

9. Utilisez l'implémentation de Newman de la quadrature gaussienne pour calculer la portée dans l'eau en unités de longueur, à une précision de  $10^{-9}$  cm. Déterminez d'abord le nombre  $N$  de points à considérer pour atteindre cette précision. Estimez ensuite combien de protons par seconde votre algorithme pourra traiter. Pour ce faire, générez 10 000 protons tirés de la distribution en énergie décrite plus haut (avec la routine `numpy.random.normal`) et utilisez le module `timeit` pour estimer le temps requis. Attention à ne pas réestimer les poids à chaque fois, on vise la rapidité! Faites aussi un histogramme des portées obtenues pour ces 10 000 protons.
10. Répétez cet exercice avec la routine des trapèzes développée plus haut, sans son côté adaptatif (utilisez un nombre de tranches suffisant pour atteindre la précision désirée et ne calculez pas l'erreur à chaque fois, on vise la rapidité).
11. Répétez cet exercice avec la routine `scipy.integrate.quad` et détaillez sommairement la méthode d'intégration de celle-ci. Discutez l'ensemble de ces résultats liés à la vitesse d'exécution, en prenant soin de spécifier le matériel utilisé.
12. Seriez-vous en mesure de concevoir un algorithme pouvant traiter un nombre encore plus important de protons par seconde tout en obtenant la même distribution finale de portées  $R_{CSDA}$ ?

## Énergie déposée

Il est possible de calculer l'énergie déposée pour un pas de déplacement du proton  $s$  dans un milieu comme suit :

$$s = \int_{T_f}^{T_i} \frac{dT'}{S_{col}}, \quad (8)$$

où  $T_i$  et  $T_f$  sont les énergies cinétiques respectivement avant et après que le proton ait subi l'atténuation d'épaisseur  $s$  du matériau.

13. Écrire un algorithme capable de réaliser le transport des protons subissant une décélération continue dans le milieu et tracer le dépôt d'énergie en fonction de la profondeur pour l'eau et l'os pour des proton d'énergie cinétique 100 MeV. Votre courbe comportera un point où l'énergie déposée est nulle. La position de ce point est-elle conforme à vos résultats antérieurs sur la portée ? Qu'est-ce qui influence sa valeur ?
14. On nomme cette courbe le pic de Bragg. En déduire l'intérêt des protons pour la radiothérapie.
15. Établir un algorithme capable de déterminer l'énergie du faisceau de protons à utiliser pour traiter un mélanome situé à une distance  $D$  (en cm) de la surface oculaire. Calculer l'énergie nécessaire pour une lésion à  $D=4$  cm de la surface. La précision souhaitée est de 0.01 MeV.
16. En quoi les protons sont-ils préférables aux photons pour traiter un mélanome oculaire ?
17. Dans l'approche développée ici, les protons vont essentiellement en ligne droite dans la matière. Est-ce réaliste ? Que devra-t-on éventuellement ajouter à notre modèle ?

## Instructions pour la remise

Le travail devra être complété individuellement ou en binôme sous format de cahier de bord IPython/jupyter (.ipnb) et remis dans la boîte de dépôt créée à cette fin. Ce document contiendra **toutes informations pertinentes** permettant au lecteur d'apprécier vos résultats et conclusions, incluant le code Python utilisé et d'éventuelles références bibliographiques. La qualité de la présentation est très importante (utilisation de sections, de graphiques appropriés, de mise en contexte, etc.).

Prenez soin de bien indiquer votre (ou vos) nom(s) dans le cahier de bord. Pour faciliter la tâche de classification, utilisez la nomenclature suivante pour le fichier transmis (un seul) :

TPn\_nom1.ipnb ou TPn\_nom1\_nom2.ipnb

## Références

- [1] M. J. Berger, J. S. Coursey, M. A. Zucker, and J. Chang, "ESTAR, PSTAR, and ASTAR : Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3)," tech. rep., Gaithersburg MD, 2005.
- [2] M. E. Newman, *Computational Physics*. CreateSpace, 2013.