

TP 1: Parcours des protons dans la matière

contenu développé par Daniel Maneval

Date de remise: 21 février 2025

PHY-3500 – Physique numérique (H25)

Chargé de cours : Xavier Roy-Pomerleau

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 aux alentours. De ce fait, 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 monde¹. TRIUMF² 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 ne soit trop irradié. Autrement, cela pourrait causer la cécité .

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.

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

2. <https://www.triumf.ca/proton-irradiation-facility>

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. Il permet de calculer la perte d'énergie par unité de distance d'une particule chargée dans un milieu donné. Des développements additionnels ont été réalisés par Barkas et Bloch afin de tenir compte des limites de cette approximation au-delà du premier ordre³. Ces termes d'ordre supérieur deviennent significatifs pour des ions de faible vitesse. Conceptuellement, le pouvoir d'arrêt collisionnel linéique S_{col} d'un milieu s'exprime par

$$S_{col} = - \left(\frac{dT}{dx} \right)_{col} \quad (1)$$

et correspond à l'opposé de la variation d'énergie cinétique de la particule (T) par unité de longueur. Avec la correction du modèle en couches, d'effet de la polarisation et des corrections d'ordres supérieurs en Z , l'expression détaillée du pouvoir d'arrêt collisionnel linéique des protons est

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

avec

- r_e le rayon classique de l'électron,
- m_e est l'énergie de masse de l'électron,
- c est la vitesse de la lumière,
- n_e la densité électronique du matériau,
- Z est le nombre de charges de la particule ($Z = 1$ pour les protons),
- $\beta = v/c$ (et v est la vitesse de la particule),
- I l'énergie moyenne d'excitation du matériau, accessible sur [1],
- γ le facteur de Lorentz,
- δ 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 .
- T_e^{max} est l'énergie maximale transférable à un électron par le proton :

$$T_e^{max} = \frac{2m_e c^2 (\gamma^2 - 1)}{1 + 2\gamma \frac{m_e}{m_p} + \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2}, \quad (3)$$

où m_p représente l'énergie de masse du proton.

3. voir détails à https://en.wikipedia.org/wiki/Bethe_formula

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

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

où nous avons utilisé le fait que $(\gamma^2 - 1) = \beta^2 \gamma^2$.

Dans cet expression, le matériau dans lequel se propage la particule chargée est défini par les termes n_e et I seulement. De plus, pour ce travail, vous devez utiliser le système d'unités où les énergies de masse sont en MeV/c² et les longueurs en cm.

Puisque le pouvoir d'arrêt dépend de la densité du matériau traversé, il est d'usage de diviser le pouvoir d'arrêt linéique par la densité (ρ en g/cm³) pour définir le pouvoir d'arrêt collisionnel massique et éliminer cette dépendance. Le pouvoir collisionnel massique est alors simplement

$$\frac{S_{col}}{\rho} = - \left(\frac{1}{\rho} \frac{dT}{dx} \right)_{col} \quad (5)$$

Sous cette forme, les unités sont des MeV/[g/cm²] et représentent l'énergie déposée par gramme de matériau contenu dans une tranche d'interaction. De cette manière, les substances ayant la même composition mais se présentant sous différents états (l'eau liquide et l'eau gazeuse par exemple) auront le même pouvoir collisionnel massique.

Les particules chargées se propageant dans la matière peuvent aussi engendrer des interactions nucléaires et subir des pertes radiatives (surtout pour les particules légères comme les électrons) mais dans ce TP, seul le pouvoir d'arrêt collisionnel (électronique) sera considéré.

En général, les accélérateurs dédiés à la protonthérapie produisent des faisceaux de particules dans la gamme 70-250 MeV. En première approximation, on peut considérer les humains comme étant constitués d'eau liquide.

Questions

1. Exprimez la densité électronique n_e d'un milieu en fonction de sa composition atomique et de sa masse volumique ρ , et calculez n_e pour l'eau (liquide) et l'os compact (définition de l'ICRU). On s'appuiera sur les données du NIST⁴ pour les compositions atomiques de ces matériaux.
2. Tracez les courbes du pouvoir d'arrêt collisionnel massique pour ces milieux en fonction de l'énergie cinétique (T). Pour expliciter la dépendance en T de S_{col} , utilisez les relations 9 et 10 ci-bas. Pour le graphique, utilisez une échelle logarithmique en abscisse. Vous trouverez les énergies moyennes d'excitation I de ces matériaux sur le site du NIST également.

4. voir <https://physics.nist.gov/cgi-bin/Star/compos.pl?ap>

Portée des protons dans la matière

L'approximation d'une décélération continue (*Continuous Slowing Down Approximation*, CSDA) des protons dans la matière, en ligne droite, permet d'estimer leur portée dans le milieu considéré (la distance qu'ils peuvent parcourir avant d'avoir transféré au milieu la totalité de leur énergie cinétique initiale). Ici, seuls les transferts d'énergie vers les électrons du milieu sont considérés.

3. En quoi la seule considération des interactions des protons avec les électrons du milieu est-elle justifiée ? Appuyez votre réponse en comparant les contributions des interactions nucléaires (protons avec noyaux atomiques du milieu) et radiatives (pertes d'énergie par *Bremsstrahlung*) au pouvoir d'arrêt total sur la plage 3-250 MeV. Les données PSTAR et un graphique pourraient être utiles.

La portée par CSDA (R_{CSDA}) est obtenue en intégrant l'inverse du pouvoir d'arrêt total par rapport à l'énergie :

$$R_{CSDA} = \int_0^{T_i} \frac{dT'}{S_{col}}, \quad (6)$$

4. Pourquoi intègre-t-on l'inverse du pouvoir d'arrêt pour déterminer la portée ?
5. Justifiez la nécessité d'employer une méthode numérique pour calculer la portée des protons.
6. Implémenter deux algorithmes d'intégration numérique pour calculer la portée des protons dans l'eau et dans l'os compact ; le premier avec la méthode des trapèzes et le second avec la méthode de Romberg. Considérez des protons d'énergie initiale de 150 MeV à l'entrée du milieu. Estimez le nombre de tranches requises pour atteindre la précision machine avec chaque méthode, et discutez des conséquences sur le temps de calcul. Notez que comme l'expression 4 n'est valide que pour des protons ayant une énergie supérieure à 3 MeV, cette valeur sera utilisée comme borne d'intégration au lieu de 0. Le biais introduit dans les résultats par cette approximation ne vous sera pas reproché.
7. Tracez un graphique de la portée calculée par chaque méthode en fonction du nombre d'échantillons (de tranches) considéré. Le même graphique rapportera l'estimation pratique de l'erreur d'approximation pour les deux méthodes (avec une échelle différente en ordonnée). Votre graphique comprendra des points choisis de façon à bien représenter le comportement de vos algorithmes (des échelles logarithmiques pourraient être nécessaires). Doubler le nombre de tranches entre chaque évaluation pourrait s'avérer judicieux.

Estimation analytique de l'erreur

Pour la méthode des trapèzes, obtenez la valeur de l'erreur sur la portée calculée à l'ordre le plus grand. À cette fin, il faut connaître la dérivée première de la fonction à intégrer (qui est l'inverse du pouvoir d'arrêt).

8. Établir l'expression analytique de la dérivée du pouvoir d'arrêt en fonction de T . Cette première étape vous permettra de calculer la dérivée de l'inverse du pouvoir d'arrêt plus facilement ensuite. Pour vous aider, vous pouvez exprimer le pouvoir d'arrêt en fonction de γ et utiliser le théorème de dérivation des fonctions composées. Utilisez aussi les définitions suivantes pour simplifier la notation :

$$T_e^{max} = \frac{a(\gamma^2 - 1)}{b + \delta\gamma}, \quad \text{avec} \quad a = 2m_e c^2, \quad b = 1 + \left(\frac{m_e}{m_p}\right)^2 \quad \text{et} \quad \delta = 2\frac{m_e}{m_p}. \quad (7)$$

et

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

$$k = \frac{a^2}{I^2} \quad (8)$$

sachant aussi que

$$T = (\gamma - 1)m_p c^2 \quad \Rightarrow \quad \gamma = \frac{T}{m_p c^2} + 1 \quad (9)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \Rightarrow \quad \gamma^2 \beta^2 = (\gamma^2 - 1) \quad (10)$$

9. Rapportez vos portées calculées dans un tableau, qui comprendra aussi les erreurs d'approximation calculées (pour la méthode des trapèzes) et évaluées de façon pratique (pour la méthode des trapèzes et de Romberg). Il s'agit essentiellement des résultats déjà obtenus (auxquels on ajoute les erreurs calculées pour la méthode des trapèzes). Commentez vos résultats.

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 distribution de Moyal, que vous pourrez générer avec `scipy.stats.moyal` avec les paramètres `loc=150`, `scale=4` (unités en MeV).

10. Utilisez `moyal.rvs` pour générer aléatoirement 10 000 énergies tirées de cette distribution et tracez-la (sous forme d'histogramme).
11. À l'aide du module `timeit`, estimez le nombre de protons que vous pouvez calculer par seconde selon trois méthodes : vos implémentations des méthodes par trapèzes et Romberg ainsi que la fonction `scipy.integrate.quad`. Utilisez les 10 000 valeurs d'énergie générées plus haut pour faire vos tests. Afin de comparer des pommes avec des pommes, vos calculs doivent tous atteindre la précision par défaut de la routine `scipy.integrate.quad`.
12. Faites aussi un histogramme des portées obtenues pour ces 10 000 protons et commentez la distribution obtenue (peut-être en faisant référence au théorème central limite ?)

Énergie déposée

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

$$s = \int_{T_f}^{T_i} \frac{dT'}{S_{col}}, \quad (11)$$

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

13. Écrivez un algorithme capable de réaliser le transport des protons subissant une décélération continue dans le milieu et tracez le dépôt d'énergie en fonction de la profondeur pour l'eau et l'os pour des proton d'énergie cinétique 150 MeV (faisceau monoénergétique). 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. Selon vous, est-il nécessaire de calculer les portées jusqu'à la précision machine en protonthérapie ? Pourquoi ?
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 en trinômes sous format de cahier de bord **jupyter** (.ipynb) 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_nom2_nom3.ipynb

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.