

Метод быстрого вычисления ионизационных потерь в системе планирования ионной лучевой терапии

А.А. Ларионов,^{1,*} О.П. Ющенко¹

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» — Институт физики высоких энергий им. А.А. Логанова
Россия, 142281, г. Протвино, пл. Науки, 1

(Поступила в редакцию 09.06.2026; после доработки 14.07.2026; подписана в печать 14.07.2026)

В рамках создания центра ионной лучевой терапии в НИЦ «Курчатовский институт» — ИФВЭ проводится разработка системы планирования, которая опирается, в частности, на методы быстрого Монте-Карло. Эти методы должны обеспечивать скорость работы не менее чем на порядок более высокую, по сравнению со стандартными пакетами Монте-Карло (например, GEANT4), при сравнимой точности.

В работе представлен практический метод быстрого вычисления ионизационных потерь и пропагации ионов в сложных средах, который реализован в разрабатываемой системе планирования ионной лучевой терапии.

PACS: 87.53.Tf УДК: 539.1

Ключевые слова: ионная лучевая терапия, система планирования, Монте-Карло, ионизационные потери.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.81.2640702](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.81.2640702)

ВВЕДЕНИЕ

Лучевая терапия [1] зарекомендовала себя как перспективный и весьма эффективный метод лечения онкологических заболеваний. Она опирается на методы планирования, суть которых состоит в расчете дозовых полей и определении параметров пассивных элементов, обеспечивающих требуемое дозовое поле. Конкретная реализация методов планирования существенно зависит от типа используемого пучка. Так, в случае использования фотонных пучков существуют весьма развитые аналитические и полуаналитические методы расчетов. Использование протонных пучков обычно опирается на полуаналитические методы (модели Бортфельда [2] и Ульмера [3]). Ионные пучки демонстрируют значительный вклад фрагментационных процессов и требуют использования прямых методов Монте-Карло (МК) [4].

Существуют развитые и хорошо верифицированные пакеты МК, поддерживающие детальное моделирование разнообразных физических процессов (например, FLUKA [5], GEANT4 [6]). На основе этих пакетов можно создать систему планирования (СП), которая позволяет успешно решать необходимые задачи. Платой за универсальность пакетов МК являются чрезвычайно высокие требования к вычислительным ресурсам и, соответственно, большое время работы СП при построении плана облучения (ПО). В то же время практическая задача построения ПО должна решаться за весьма ограниченное время (не более нескольких часов).

В настоящее время в НИЦ «Курчатовский Институт» — ИФВЭ создается центр ионной лучевой терапии [7]. Одной из важнейших задач является разработка СП. Эта разработка ведется по двум направлениям: использование МК-пакета GEANT4 и развитие быстрых методов моделирования пропагации ионов в веществе (система быстрого Монте-Карло — СБМК). Последние методы должны обеспечивать точность моделирования, сравнимую с GEANT4, а время работы СП должно быть как минимум на порядок меньше. Эти методы включают моделирование ионизационных потерь, упругих и неупругих (фрагментация) процессов, многократного кулоновского рассеяния, а также специфические методы навигации и пропагации в геометрии и веществах, характерных для СП.

В данной и последующих работах мы детально остановимся на методах и алгоритмах, используемых в СБМК. Эта работа посвящена методам быстрого вычисления ионизационных потерь. Предлагается новый алгоритм аппроксимации ионизационных потерь, позволяющий значительно сократить размер используемых таблиц и ускорить процедуры интегрирования при пропагации заряженных частиц. Данный алгоритм, а также методы вычисления ионизационных потерь и их интегрирования на шаге пропагации реализованы как компоненты СБМК.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Терапевтический эффект воздействия ионизирующего излучения на ткани человеческого организма связан с процессами ионизации атомов налетаю-

* E-mail: Andrei.Larionov@ihep.ru

щими ионами. Именно ионизационные потери (ИП) определяют физическую и в конечном счете биологическую дозу при учете линейной передачи энергии (ЛПЭ) и биологической модели [8]. В рамках LQ-модели [9] основными параметрами, определяющими выживаемость клеток под действием ионизирующего излучения, являются ЛПЭ и физическая доза. Параметры LQ-модели (α и β) могут быть определены как функция ЛПЭ в различных биологических моделях: LEM I [10], LEM II [11], LEM III [12] и МКМ [13]. Сравнение выживаемости клеток, посчитанных для конкретной модели и для реперного фотонного излучения, при заданном уровне выживаемости определяет относительную биологическую эффективность (ОБЭ) и физическую дозу, которая будет соответствовать требуемой биологической. Конкретная биологическая модель, тип клеточной линии, требуемая биологическая доза определяются врачом.

Моделирование пропагации ионов и вычисление ИП опираются на свойства материалов, такие как плотность и химический состав. В СП ионной терапии используются стандартные материалы, из которых изготавливаются пассивные элементы (болюс [14], гребенчатый фильтр [15], различные дегрейдеры и коллиматоры [16]) — сталь, алюминий, различные типы полимеров. Дополнительно добавлены материалы, используемые в протезировании и при изготовлении различных имплантов, — цирконий, двуокись циркония, кевлар, титан, силиконы.

Описание тканей человеческого организма основывается на интерпретации чисел Хаунсфилда [17], развитой в работе Шнайдер [18]. Диапазон чисел Хаунсфилда ($-1000 \leq HU \leq 1560$), соответствующий тканям человеческого тела, разбивается на 6 интервалов, в каждом из которых задана линейная аппроксимация плотности, и на 24 интервала, в которых задаются химические свойства ткани (будем называть их «материалы Шнайдер»). Эти свойства представляют собой весовые доли различных атомов (см. [18]) в ткани.

Стандартные материалы и материалы Шнайдер формируют вещества-мишени, для которых мы должны вычислять ионизационные потери. При этом материалы Шнайдер имеют переменную плотность, в зависимости от значения HU.

Налетающие ионы не ограничиваются только ионами углерода. Неупругие процессы взаимодействия налетающих ионов с атомами (фрагментация) приводят к образованию вторичных ионов, которые имеют значительную кинетическую энергию. Эти фрагменты производят существенную ионизацию (вклад фрагментов в физическую дозу может достигать 20%), и их распространение в веществе должно детально моделироваться.

Для определения значимых ионов, вклад которых во вторичную ионизацию составляет не менее 0.1%, было проведено детальное моделирование пропагации различных ионов с кинетической энергией в терапевтическом интервале

(50–450 МэВ/нуклон для ионов углерода, например) на всех материалах, упомянутых выше. Использовался пакет МК GEANT4.

В результате анализа был определен список из 30 изотопов, для каждого из которых необходимо вычислять ионизационные потери. В этот список входят как легкие ионы (водород, дейтерий, ионы гелия, лития, бора, углерода), так и тяжелые ионы — фрагменты ядер-мишеней до циркония включительно. Способ определения этих ионов будет детально обсуждаться в работе, посвященной методам моделирования процессов фрагментации в СБМК.

Таким образом, при работе СП нам требуется вычисление ионизационных потерь в широком интервале кинетических энергий для 30 ионов при их рассеянии на всех стандартных материалах и материалах Шнайдер (38 материалов).

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ.

Ионизационные потери при рассеянии иона на атоме описываются формулой Бете–Блоха:

$$-\frac{dE}{dX} = 4\pi m_e c^2 r_e^2 \rho N_A \frac{Z_1^2 Z_2}{A_1 A_2} \frac{1}{\beta^2} \times \left\{ \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 T_{\max}}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} \right\} = S(E), \quad (1)$$

где

$$T_{\max} = \frac{2\beta^2 \gamma^2 m c^2}{1 + 2\gamma \frac{m}{M} + \left(\frac{m}{M}\right)^2}$$

— максимальная кинетическая энергия, которая может быть передана электрону в процессе ионизации, индексы 1 и 2 относятся к налетающей частице и ядру-мишени соответственно: m и M — массы налетающей частицы и мишени, I — ионизационный потенциал атома-мишени, r_e — классический радиус электрона, $\beta = v/c$ и $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ — релятивистские параметры, N_A — число Авогадро, Z — заряд в единицах элементарного заряда, A — атомная масса, ρ — плотность вещества.

Данное уравнение содержит параметр δ , который включает в себя разнообразные поправки: Линдхарда–Сёренсена [19], поправку Баркаса [20, 21], оболочечные поправки [22–24], эффект экранирования заряда. Здесь упомянуты наиболее значимые в нерелятивистской области поправки. Вклад остальных не превысит 0.1%.

При переходе от единичного ядра-мишени к сложному веществу заряд, атомная масса и ионизационный потенциал в выражении (1) заменяются на средние значения с учетом весовых вкладов различных атомов.

Вычисление ИП необходимо осуществлять на каждом шаге пропагации иона в веществе. Очевид-

но, что детальный учет различных поправок приведет к большому объему вычислений. Решением проблемы является подготовка таблиц ИП для всех ионов во всех материалах в широком диапазоне энергий.

Наиболее простым методом построения подобных таблиц является использование пакета GEANT4, который хорошо верифицирован и широко используется в медицинской физике [25]. GEANT4 позволяет определять произвольно сложные вещества, обеспечивает аккуратный учет разнообразных поправок. С использованием GEANT4 были получены таблицы ИП с шагом 0.1 МэВ для всех пар ион–мишень в широких диапазонах кинетической энергии налетающего иона. На рис. 1 приведен характерный вид dE/dX для иона углерода в мягких тканях ($HU = 50$). Левый график приведен для всего кинематического интервала 1–3500 МэВ, правый — для малых энергий (район пика Брэгга)

Таким образом, в практических вычислениях удастся избежать затратных вычислений поправок на каждом шаге пропагации. Кроме того, эффективные процедуры доступа к таблицам ИП и метод интегрирования обеспечивают высокую скорость вычислений ИП для всех комбинаций ион–мишень во всем необходимом диапазоне энергии.

Для количественного сравнения использовались данные КТ реального пациента. Использовался пучок ионов углерода с энергией 200 МэВ/нуклон, равномерно распределенный в круге радиусом 20 мм. Общее количество ионов углерода, направляемых на пациента как для GEANT4, так и для СБМК, составляло по 10 миллионов. Использовалась версия GEANT4 10.7.4, в которой были отключены все адронные взаимодействия. Все электромагнитные, включая многократное рассеяние, были активны (модульный физический список G4EmStandardPhysics_option4). В СБМК так же было активировано многократное рассеяние.

Тесты для GEANT4 и СБМК проводились в одинаковых условиях: один и тот же компьютер, одинаковое количество активных потоков. Время, затраченное GEANT4, составило 3 мин 48 с, СБМК — 4 с.

3. ЗАДАЧА ПРОПАГАЦИИ ИОНА В ВЕЩЕСТВЕ

При прохождении ионов через фантом пациента рассматривается пропагация в каждом отдельном вокселе, который характеризуется приписанным ему материалом. Общий алгоритм пропагации оценивает шаг, который совершает ион в вокселе до его границы либо до точки, где должно произойти дискретное взаимодействие (рассеяние или фрагментация). Таким образом, задается воксель, исходная точка в вокселе, тип иона, вектор импульса иона, его кинетическая энергия в данной точке и шаг пропагации. Задача учета ионизационных по-

терь состоит в том, чтобы оценить значение кинетической энергии в конце шага пропагации.

Для решения задачи пропагации необходимо решить дифференциальное уравнение (1) при заданной начальной энергии иона и шаге пропагации. Решение этого уравнения имеет вид:

$$\Delta X = - \int_{E_0}^{E_1} \frac{1}{S(E)} dE. \quad (2)$$

Прямое интегрирование в элементарных функциях невозможно, поэтому необходимо рассмотреть численные методы.

На рис. 2 приведен вид функции $1/(dE/dX)$ в диапазоне 1–3500 МэВ и в области малых энергий.

Один из методов, который можно применить для численного интегрирования, состоит в кусочной аппроксимации этой функции полиномами, а затем аналитическое интегрирование в соответствующих интервалах. В данном случае можно воспользоваться полиномами второго порядка, но интегрирование приведет к полиномам третьего порядка и их решению в процессе пропагации на каждом шаге. Воспользуемся иным методом.

Значения функции $1/(dE/dX)$ заданы в фиксированных точках по энергии: $E = 0.1, 0.2, 0.3, \dots$ МэВ. Будем использовать линейную интерполяцию между точками E_i и E_j . Здесь i и j обозначают границы расчетного интервала, который может объединять несколько стандартных шагов по энергии. В этом случае вся область интегрирования разбивается на последовательность трапеций, площадь которых (интеграл) считается тривиально. Тогда шаг иона при распространении в веществе, при изменении его энергии от значения в узле j до значения в узле i (энергия уменьшается!) задается тривиальным выражением:

$$\Delta X(j \rightarrow i) = \frac{1}{2} (E_j - E_i) (1/S(E_j) + 1/S(E_i)). \quad (2)$$

Тем самым задачу интегрирования решаем как обратную задачу: совершая шаги по энергии, мы контролируем перемещение иона и останавливаемся, когда аккумулированное перемещение соответствует заданному шагу. Возможна ситуация, когда последний шаг между точками в пространстве энергии $i+1$ и i приводит к превышения заданного шага в координатном пространстве. В этом случае необходимо в интервале $(i+1 - i)$ найти значение энергии, которое обеспечит точное выполнение заданных условий. Это приводит к квадратному уравнению, которое всегда имеет одно действительное положительное решение.

Для существенного ускорения процесса вычислений и сокращения объема обрабатываемых данных был разработан и применен метод адаптивной кусочно-линейной аппроксимации. Модифицированный алгоритм его реализации, а также блок-схема алгоритма представлены ниже.

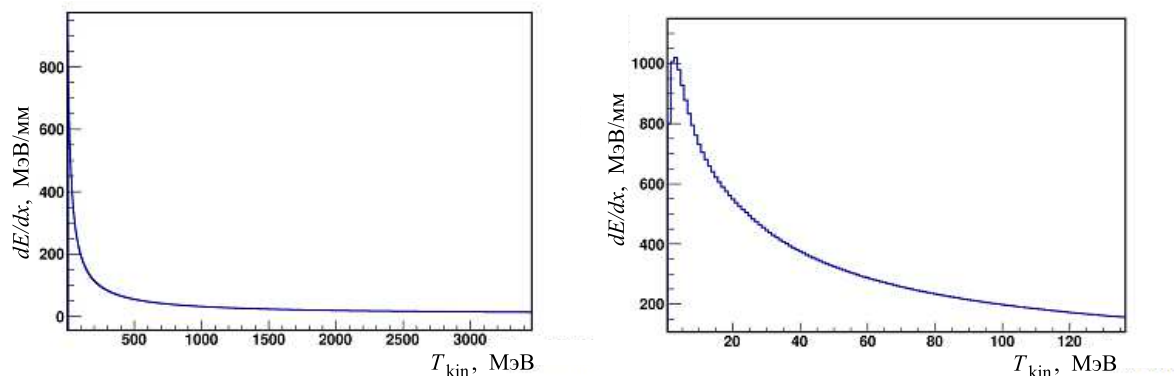
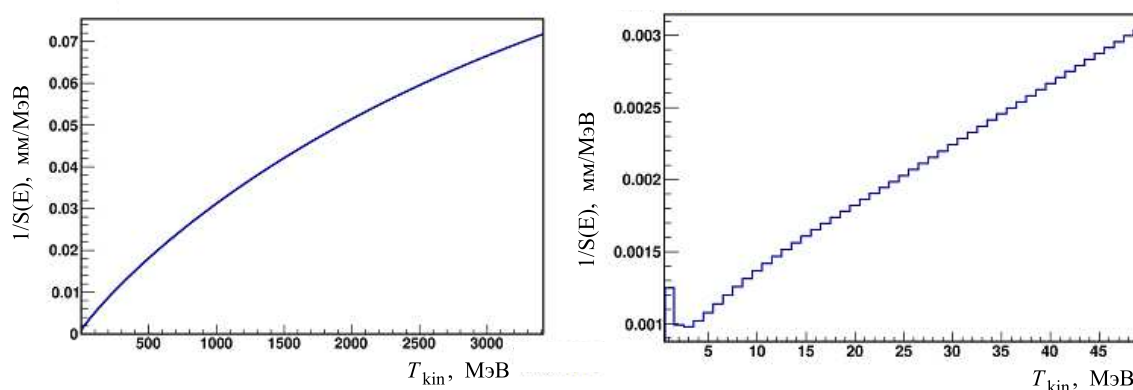
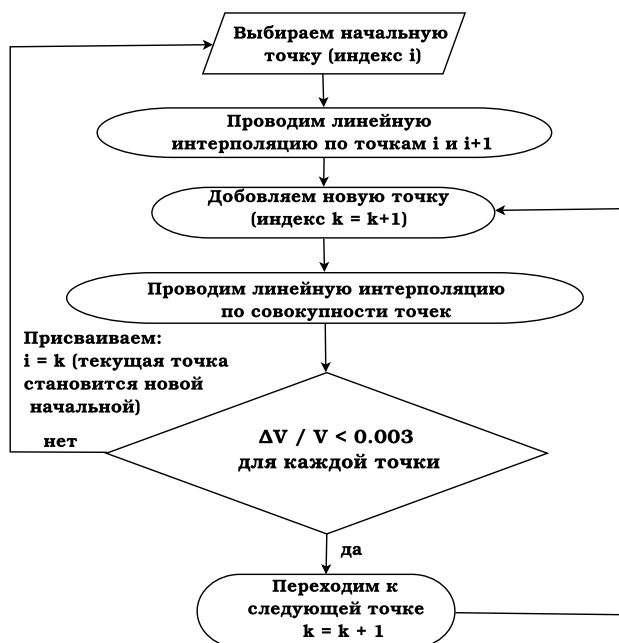

 Рис. 1. Зависимость dE/dX для иона углерода

 Рис. 2. Поведение функции $1/(dE/dX)$


Рис. 3. Алгоритм построения сетки

данной с постоянным шагом $\Delta E = 100$ кэВ, на линейные участки. В процессе работы алгоритм строго контролирует относительную погрешность аппроксимации в каждой точке и выполняется по следующим шагам:

1. Инициализация. Точка массива с индексом i фиксируется как левая граница текущего линейного интервала.
2. Базовый интервал. Между точками i и $i + 1$ строится начальный отрезок линейной интерполяции.
3. Расширение интервала. К текущему отрезку последовательно добавляется следующая точка $k = k + 1$. По всей совокупности точек (от i до k) строится единая сквозная линейная зависимость.
4. Контроль точности. Для всех точек внутри интервала вычисляется максимальная относительная погрешность ухода фита от исходных данных. Для любой точки из интервала $[i - k]$ должно выполняться условие: $|\frac{\Delta V}{V}| < 0.003$ (отклонение не более 0.3%), где $V = 1/S$ — точное значение в соответствующей точке, а ΔV — разница между точным зна-

В основе алгоритма лежит оптимальное разбиение графика функции потерь энергии $1/S(E)$, за-

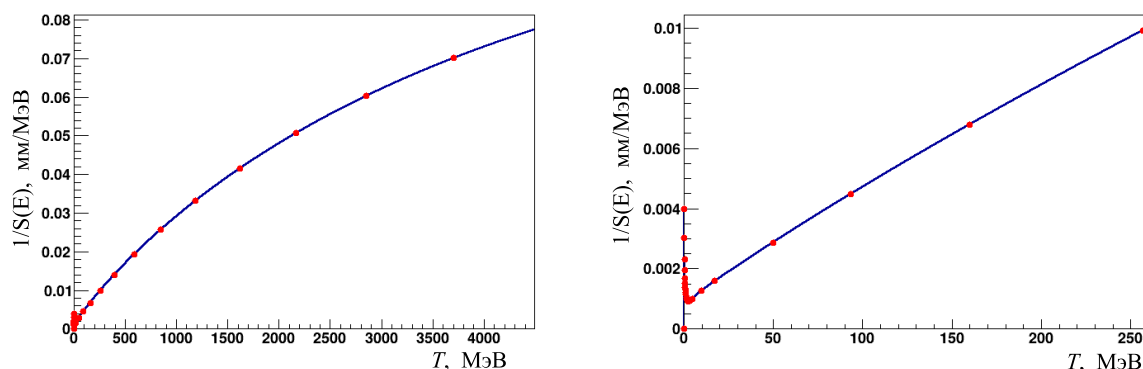


Рис. 4. Примеры полученных отрезков для C12 для всего кинематического интервала (слева) и для малых энергий (справа)

чением и значением, полученным из параметров фита.

5. Условный переход.

- Если критерий точности выполнен, точка k включается в текущий отрезок, и алгоритм возвращается к шагу 3.
- Если критерий нарушен, точка k объявляется началом нового интервала ($i = k$), и процедура циклически повторяется.

Результаты работы алгоритма представлены на рис. 4. Красные точки соответствуют полученным узлам сетки разбиения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана техника быстрого вычисления ионизационных потерь и метод пропагации заряженных частиц в веществе. Метод базируется на использовании заранее вычисленных таблиц ионизационных

потерь для всех возможных ионов и для всех материалов, которые могут входить в состав фантома (пациента), а также в пассивные элементы канала формирования дозового поля. Данный метод обеспечивает относительную точность не хуже 0.3% при вычислении ионизационных потерь. Эта оценка основана, собственно, на алгоритме построения реперной сетки и методе вычисления. Исходные данные, использованные в алгоритме, основаны на вычислениях GEANT4 и соответствуют формуле Бете-Блоха со всеми поправками. Такая точность полностью соответствует требованиям, предъявляемым к расчетам системы планирования лучевой терапии (см., например, [26]).

Разработанные методы и алгоритмы реализованы в виде пакета на языке C++ в объектно-ориентированном подходе и являются частью физического ядра СБМК.

Данный алгоритм уже применен при расчете болюса для ионной лучевой терапии [27]. Полученные результаты демонстрируют отличное сходство с болюсом, рассчитанным с помощью программы, основанной на GEANT4.

[1] Клёнов Г.И., Хорошков В.С. // *УФН* **186**. 891 (2016).
 [2] Bortfeld T, Schlegel W // *Phys. Med. Biol.* **41**. 1331 (1996).
 [3] Ulmer W. // *Radiation Physics and Chemistry*, **76(7)**, 1089 (2007).
 [4] Климанов В.А. Радиобиологическое и дозиметрическое планирование лучевой и радионуклидной терапии. Часть 2. М.: НИЯУ МИФИ, 2011.
 [5] Battistoni G. et al. // *Annals of Nuclear Energy*, **82**. 10 (2015).
 [6] Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K. et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **506(3)**. 250 (2003).
 [7] НИЦ «Курчатовский институт»-ИФВЭ и НМИРЦ Минздрава России — МРНЦ им. А.Ф. Циба. Центр ионной лучевой терапии на базе ускорительного комплекса У-70.

Протвино, 2017.
 [8] Borshchegovskaya P.Yu., Rozanov V.V., Studenikin F.R. Interaction of ionizing radiation with matter: Textbook. M.: OOP of the Physics Faculty of Moscow State University, 2019. 78 p.: with ill. (Library of Medical Physics) ISBN 978-5-6042768-8-4.
 [9] McMahon S.J. // *Physics in Medicine & Biology* **64(1)**, 01TR01 (2018).
 [10] Scholz M., Kellerer A., Kraft-Weyrather W., Kraft G. // *Radiation and Environmental Biophysics* **36**, 59 (1997).
 [11] Elsässer T., Scholz M. // *Radiation Research* **167**. 319. (2007).
 [12] Elsässer T., Krämer M., Scholz M. // *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics* **71**. 866 (2008).
 [13] Hawkins R. // *Radiation Research* **160**. 61 (2003).
 [14] Ларионов А.А., Ющенко О.П. Расчет формы болюса

- са в системе планирования ионной лучевой терапии. Международная конференция «ЯДРО-2025. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Ядерно-физические технологии». г. Санкт-Петербург, 2024. с. 1-11
- [15] Babkin V.A., Cata-Danil G., Golovatyuk V.M. et al. // *Central European Journal of Physics*, **8(4)**. 683 (2010) .
- [16] Воробьев А.П. и др. Многолепестковый Коллиматор. Препринт НИЦ «Курчатовский институт»–ИФВЭ 2024-4. Протвино, 2024
- [17] Hounsfield G.N. // *Br. J. Radiol.* **46(552)**. 1016 (1973) .
- [18] Schneider W, Bortfeld T, Schlegel W. // *Phys Med Biol.* **45(2)**. 459 (2000).
- [19] Lindhard J, Sorensen A.H. // *Phys Rev A.* **53(4)** 2443 (1996) PMID: 9913157
- [20] Barkas W.H., Dyer N.J., Heckman H.H., // *Phys. Rev. Lett.* **11(1)**. 26 (1963) .
- [21] Heckman H.H., Lindstrom P.J. // *Phys. Rev. Lett.* **22(17)**. 871 (1969).
- [22] Fano U. // *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13** (1963).
- [23] Bichsel H. Passage of charged particles through matter in: D.E. Gray (Ed.), AIP Handbook, third ed., McGraw-Hill, New York, 1972, Chapter 8, p. 142.
- [24] Bichsel H. // *Phys. Rev. A*, **46(9)**. 5761 (1992).
- [25] Arce P., Bolst D., Bordage M.C. et al. // *Med Phys.* **48(1)**. 19 (2021).
- [26] Требования к точности и факторы неопределенности в лучевой терапии. IAEA Human Health Series, **31**. (2022).
- [27] Ларионов А.А., Студеникин Ф.П., Ющенко О.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. № 3. 2630702 (2026).

Method for Fast Calculation of Ionisation Losses in an Ion Beam Therapy Planning System

A. A. Larionov^a, O. P. Yushchenko^b

National Research Center «Kurchatov Institute»–A.A. Logunov Institute of High Energy Physics
Protvino 142281, Russia

E-mail: ^a Andrei.Larionov@ihep.ru, ^b Oleg.Yushchenko@ihep.ru

Within the framework of establishing an ion beam therapy centre at the NRC (National Research Center) “Kurchatov Institute” — IHEP, a planning system is being developed which relies, in particular, on fast Monte Carlo methods. These methods must provide an operating speed at least one order of magnitude higher than that of standard Monte Carlo packages (e.g., GEANT4), with comparable accuracy.

The paper presents a practical method for fast calculation of ionisation losses and ion propagation in complex media, which has been implemented in the ion beam therapy planning system under development.

PACS: 87.53.Tf

Keywords: ion beam therapy, planning system, Monte Carlo, ionization losses.

Received 09 June 2026.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2026. **81**, No. . Pp. .

Сведения об авторах

1. Ларионов Андрей Александрович — инженер-исследователь; e-mail: Andrei.Larionov@ihep.ru.
2. Ющенко Олег Петрович — доктор физ.-мат. наук, гл. науч. сотрудник; e-mail: Oleg.Yushchenko@ihep.ru.