

THÈSE

En vue de l'obtention du **DOCTORAT ÈS-SCIENCES**

Structure de recherche : Équipe Sciences de la Matière et du Rayonnement
Discipline : Physique
Spécialité : Physique médicale

Soutenue le 08/07/2020 par :

ABOULBANINE Zakaria

Optimisation de la simulation Monte Carlo des accélérateurs linéaires médicaux en mode photons : Élaboration et développement sous Geant4 d'un modèle avancé de sources virtuelles

JURY

M.	BENCHEKROUN, Driss	PES, Faculté des Sciences-Ain Chock, UH2C	Président
Mme.	CHERKAOUI EL MOURSLI, Rajaâ	PES, Faculté des Sciences, UM5R	Rapporteur/Examineur
Mme.	EL KHAYATI, Naïma	PES, Faculté des Sciences, UM5R	Directrice de thèse
M.	TAJMOUATI, Jaouad	PES, Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, USMBA	Examineur
M.	TAYALATI, Yahya	PES, Faculté des Sciences, UM5R	Rapporteur/Examineur
M.	ZERFAOUI, Mustapha	PH, Faculté des Sciences, UMP	Rapporteur/Examineur
M.	MOUATASSIM, Samir	Dr. ès-sciences, Centre d'Oncologie Nakhil, Rabat	Invité

Année Universitaire 2019/2020

À mes chers parents et à ma chère sœur...

Remerciements

La thèse intitulée “Optimisation de la simulation Monte Carlo des accélérateurs linéaires médicaux en mode photons : Élaboration et développement sous Geant4 d’un modèle avancé de sources virtuelles”, a été réalisée sous la direction de Madame EL KHAYATI Naïma Professeur de l’Université Mohammed V de Rabat, Faculté des Sciences et membre de l’Équipe Sciences de la Matière et du Rayonnement.

Madame EL KHAYATI Naïma, Professeur de l’Enseignement Supérieur a accepté la responsabilité d’être ma directrice de thèse. Son encadrement pédagogique, ses compétences scientifiques, ses conseils et suggestions m’ont été particulièrement précieux dans l’élaboration, la réalisation et le développement de mes travaux de recherche. J’ai profité de chaque discussion avec elle pour améliorer mes approches afin d’aboutir au meilleur résultat possible. Je tiens à la remercier vivement pour le temps qu’elle m’a consacré.

Je tiens à remercier chaleureusement Monsieur BENCHEKROUN Driss Professeur de l’Enseignement Supérieur de l’Université Hassan II de Casablanca, Faculté des Sciences-Ain Chock, président du Jury de cette thèse.

Je tiens à remercier vivement Madame CHERKAOUI EL MOURSLI Rajaâ Professeur de l’Enseignement Supérieur de l’Université Mohammed V de Rabat, Faculté des Sciences et membre résident à l’Académie Hassan II des Sciences et Techniques, d’avoir accepté d’être rapporteur de cette thèse. Je vous remercie pour vos conseils et vos remarques qui m’ont permis d’améliorer mon travail.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Monsieur TAYALATI Yahya Professeur de l’Enseignement Supérieur de l’Université Mohammed V de Rabat, Faculté des Sciences et responsable de l’Équipe Sciences de la Matière et du Rayonnement, d’une part d’avoir accepté d’être rapporteur de ma thèse et d’autre part pour ses suggestions et ses propositions qui me permettront d’évoluer et d’améliorer mes travaux présents et futurs.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à Monsieur ZERFAOUI Mustapha, Professeur Habilité de l’Université Mohammed Premier d’Oujda, Faculté des Sciences, rapporteur de cette thèse, pour la discussion enrichissante que nous avons eu ainsi que pour les remarques signalées durant ma soutenance de thèse.

Je remercie chaleureusement Monsieur TAJMOUATI Jaouad Professeur de l’Enseignement Supérieur à l’Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de fès, Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, d’avoir accepté de juger ce travail en tant qu’examinateur.

Je remercie chaleureusement Monsieur MOUATASSIM Samir, Docteur ès-sciences et physicien médical au Centre d’Oncologie Nakhil à Rabat d’avoir accepté de faire partie de ce Jury en tant qu’invité examinateur. Je remercie Docteur MOUATASSIM aussi pour avoir pris le temps de lire le manuscrit malgré son emploi du temps extrêmement contraint.

Mes vifs remerciements s’adressent au Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique (CNRST) d’avoir financé cette thèse à travers la bourse N°

1UM5R2015, dans le cadre du Programme de Bourse d'Excellence de Recherche (PBER). Ce support m'a permis de me focaliser sur mes travaux de recherche. Je tiens à renouveler mes remerciements également au CNRST d'avoir mis à disposition les ressources de calculs de la plateforme High Performance Computing (HPC) où une bonne partie des simulations numériques ont été exécutées.

Grâce à la contribution du Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire (CERN) en matières de serveurs de calcul, un cluster local est maintenant opérationnel au sein de l'Équipe Sciences de la Matière et du Rayonnement à la Faculté des Sciences de Rabat. Une partie des calculs numériques réalisés durant cette thèse a été tournée sur ce cluster.

L'aboutissement de ces travaux de thèse doit beaucoup à mon père et à ma mère qui m'ont accompagné, qui m'ont encouragé et qui m'ont soutenu surtout moralement et financièrement. Je tiens à remercier ma petite sœur pour m'avoir épaulé et m'avoir donné la force nécessaire à réaliser mes ambitions.

Finalement, je tiens à exprimer ma reconnaissance à toutes les personnes qui ont contribué à l'accomplissement de ce travail de thèse.

Résumé

La planification de traitement sur ordinateur est devenue un outil indispensable dans une chaîne moderne de traitement en radiothérapie externe, visant à perfectionner la qualité des traitements par rayonnement ionisant. Monte Carlo est la méthode la plus rigoureuse pour estimer la distribution de dose dans un volume irradié, modélisant l'aspect aléatoire du transport de particules. L'obstacle majeur empêchant son intégration dans la planification de traitement est le temps d'exécution extrêmement long. L'utilisation des espaces des phases dans la simulation Monte Carlo des accélérateurs linéaires médicaux, est l'une des solutions réputées réduisant de manière remarquable le temps de calcul, tout en préservant une précision comparable à celle d'une simulation complète. En revanche les espaces des phases ne peuvent générer qu'un nombre fini de particules, ce qui peut amplifier l'incertitude statistique lorsque le même espace des phases est recyclé plusieurs fois au cours d'une même simulation. Dans la première partie de cette thèse, nous présentons une approche sophistiquée pour la simulation des accélérateurs linéaires médicaux, basée sur le concept de modèle de sources virtuelles. Une reconstruction du faisceau permettra de reproduire ses caractéristiques sans avoir recours à la modélisation de chaque composante de l'accélérateur ni au transport de particules. Cette méthode est fondée sur l'étude des dépendances entre les différentes variables extraites des espaces des phases convertis sous forme de fonctions de densité de probabilité corrélées. Dans la deuxième partie, une fonction analytique jouant le rôle du collimateur multilames permettant de faire un filtrage de la fluence de particules a été introduite au modèle. Trois faisceaux de photons de deux configurations d'accélérateurs ont été étudiés pour valider l'approche. De bons résultats ont été obtenus en termes d'analyse γ_{index} , comparant les distributions de dose du modèle et des espaces des phases, calculées dans un fantôme d'eau voxélisé.

Abstract

Treatment planning is a key tool in modern radiation therapy, aiming to improve the treatment quality. Monte Carlo method, widely used in many fields, calculates high precision dose distributions through modelling the random nature of particles interaction with matter. The main disadvantage preventing the use of such method in clinical treatment planning is the substantial computation time required to simulate a radiation beam delivered by a clinical linac. On the one hand the use of phase space files in linac Monte Carlo simulation is a common solution used to enhance the calculation efficiency and conserve an acceptable precision level, on the other hand, phase space files are limited and generate a finite number of particles. This means when the phase space is recycled several times during the same simulation, the obtained dose statistical uncertainty could be amplified. In the first part of this thesis work, we present a sophisticated approach to simulate medical linac photon beams based on virtual source model concept. Particles are generated through a beam reconstruction algorithm. The method uses the existing correlations between variables in a phase space file, converted into correlated probability density functions. In the second part of the work, the model is boosted with an analytical collimator filter function emulating the effect of the multileaf collimator on the particle fluence. The latest improvement considerably enhanced the efficiency of the model. Three photon beams corresponding to two linac configurations were studied to validate the model. Very satisfactory results were obtained in terms of γ_{index} analysis, the dose distributions of our model were compared to those computed using phase space files and scored in a voxelized water phantom.

“L’imagination est plus importante que le savoir.”

EINSTEIN Albert

Table des matières

Résumé	v
Abstract	vi
Table des matières	ix
Table des figures	xiv
Liste des tableaux	xxi
Liste des abréviations	xxiii
Introduction	1
1 Fondements physiques et concepts de base en radiothérapie externe	3
1.1 Introduction	3
1.2 Aperçu historique	3
1.3 Accélérateur linéaire	4
1.3.1 Particule chargée et force de Lorentz	4
1.3.2 Accélération de particules	4
1.3.3 Guide d'ondes	6
1.3.4 Couplage de cavités raisonnantes	7
1.3.5 Génération des faisceaux d'irradiations	8
1.3.5.1 Système de déviation et focalisation du faisceau . . .	8
1.3.5.2 Mode électrons	9
1.3.5.3 Mode photons	9
1.4 Dosimétrie des faisceaux de photons	9
1.4.1 Énergie cinétique délivrée par unité de masse (Kerma)	9
1.4.2 Dose absorbée	10
1.4.3 Relation Kerma-Dose absorbée et notion d'équilibre électronique	12
1.4.4 Grandeurs physiques mesurables en radiothérapie externe . . .	13
1.4.4.1 Rendement en profondeur	13
1.4.4.2 Profil de dose	15
1.4.4.3 Rapport tissu air	15
1.4.4.4 Rapport tissu fantôme	16
1.5 Techniques de traitements par un linac en mode photons	17
1.5.1 Radiothérapie conformationnelle 3D	17
1.5.2 Radiothérapie conformationnelle avec modulation d'intensité .	18
1.5.2.1 Mode statique	19
1.5.2.2 Mode dynamique	19
1.5.3 Arc-thérapie avec modulation d'intensité	19
1.6 Plateau technique utilisé en radiothérapie externe	20
1.6.1 Accélérateur linéaire (linac) médical	20
1.6.2 Imageur portal	21

1.6.3	Instrumentation de mesures	21
1.6.4	Scanner simulateur	22
1.6.5	Système de planification de traitement	22
1.7	Algorithme de calcul de dose	23
1.7.1	Aperçu sur l'évolution des méthodes de calcul	23
1.7.2	Composantes du faisceau	24
1.7.2.1	Photons primaires	24
1.7.2.2	Photons diffusés dans la tête d'irradiation	24
1.7.2.3	Contamination électronique	24
1.7.2.4	Pénombre, transmission et fuites du collimateur	25
1.7.2.5	Rayonnement diffusé dans le corps du patient	25
1.7.3	Méthode du faisceau large (empirique)	25
1.7.3.1	Représentation tabulée des données du faisceau	25
1.7.3.2	Représentation analytique	26
1.7.4	Corrections associées à l'inhomogénéité et à la variation du contour du patient	27
1.7.4.1	Effet du contour du patient	27
1.7.4.2	Effet des hétérogénéités dans le corps du patient	28
1.7.5	Méthode de superposition	29
1.7.6	Approche <i>pencil-beam</i>	30
1.7.6.1	Détermination de la fluence énergétique primaire	31
1.7.6.2	Détermination du <i>kernel</i> du <i>pencil beam</i>	31
1.7.7	Méthode de convolution superposition du point <i>kernel</i>	32
1.7.7.1	Détermination de la fluence énergétique	33
1.7.7.2	Détermination de la distribution du point <i>kernel</i>	33
1.8	Conclusion	34
2	Introduction à la simulation numérique par la méthode de Monte Carlo, application en radiothérapie externe	35
2.1	Introduction	35
2.2	Principe des méthodes de Monte Carlo	35
2.2.1	Aperçu historique	35
2.2.2	Générateurs de nombres aléatoires	36
2.2.3	Intégration numérique	37
2.2.4	Précision de la méthode Monte Carlo	38
2.2.5	Méthodes d'échantillonnage non-uniforme	39
2.2.5.1	Méthode de transformation	39
2.2.5.2	Méthode de rejet	41
2.3	Généralités sur le transport de particules	43
2.3.1	Transport de photons	43
2.3.2	Transport des électrons et des positrons	45
2.3.2.1	Histoire condensée	45
2.3.2.2	Pouvoir d'arrêt restreint	46
2.3.2.3	Diffusion multiple	47
2.3.2.4	Effet de l'hétérogénéité du milieu	49
2.3.3	Section efficace	50
2.3.3.1	Coefficient d'interaction des photons	51
2.3.3.2	Pouvoir d'arrêt des particules chargées	52
2.4	Utilisation des méthodes Monte Carlo en radiothérapie externe	53
2.4.1	Modélisation directe de l'accélérateur linéaire médical	54

2.4.1.1	Détermination des caractéristiques de la source des électrons primaires	55
2.4.1.2	Simulation des photons de freinage	56
2.4.1.3	Aplatissement du faisceau	56
2.4.1.4	Collimation du faisceau	57
2.4.2	Méthodes de réduction de variance	59
2.4.2.1	Principe de base	59
2.4.2.2	Techniques de base	59
2.4.2.3	Techniques avancées	62
2.4.3	Espace des phases	62
2.4.3.1	Format de l'Agence Internationale de l'Énergie Atomique	63
2.4.3.2	Nombre de particules par unité de surface	64
2.4.4	Modèle de sources virtuelles	64
2.5	Conclusion	64
3	Notions de base sur le code de calcul Geant4	66
3.1	Introduction	66
3.2	Aperçu historique	67
3.3	Structure globale	67
3.3.1	Génération des particules primaires	69
3.3.2	Géométrie et construction de détecteurs	69
3.3.3	Processus physiques	71
3.3.3.1	Processus de Transportation	71
3.3.3.2	Processus électromagnétiques	71
3.3.3.3	Source de données de sections efficaces	72
3.3.4	<i>Tracking</i>	73
3.3.5	<i>Scoring</i>	73
3.4	Interaction des photons	74
3.4.1	Effet photoélectrique	74
3.4.2	Diffusion Compton	75
3.4.3	Matérialisation	77
3.4.4	Diffusion Rayleigh	78
3.5	Interaction des électrons	79
3.5.1	Seuil de production de particules secondaires	79
3.5.2	Ionisation	79
3.5.2.1	Perte d'énergie continue	80
3.5.2.2	Rayon δ	81
3.5.3	<i>Bremsstrahlung</i>	82
3.5.3.1	Perte d'énergie continue	82
3.5.3.2	Simulation des photons <i>Bremsstrahlung</i>	82
3.5.4	Diffusions multiples	83
3.5.5	Annihilation des positrons	83
3.5.6	<i>Step limitations</i>	83
3.5.7	Énergie par <i>step</i>	83
3.6	Architecture d'une application utilisateur	84
3.6.1	Exécution séquentielle	84
3.6.2	Exécution parallèle	86
3.7	Options d'optimisation	88
3.8	Conclusion	89

4	Élaboration et développement sous Geant4-[mt] d'un modèle de sources virtuelles	90
4.1	Introduction	90
4.2	Matériels et méthodes	91
4.2.1	Représentation des espaces des phases	91
4.2.2	Densités de probabilités des variables aléatoires de l'espace des phases	93
4.2.3	Variation de la moyenne d'une variable en fonction d'une autre	97
4.2.4	Étude de la corrélation entre deux variables	100
4.2.5	Données d'entrée du modèle à sources virtuelles	106
4.2.6	Algorithme de reconstruction	108
4.2.6.1	Source de rayonnement primaire	109
4.2.6.2	Source de rayonnement diffusé	111
4.2.7	Développement du MSV sous le code Geant4-[mt]	112
4.2.8	Modélisation du collimateur secondaire et calcul de dose dans l'eau avec Geant4-[mt]	113
4.2.8.1	Collimateur secondaire	113
4.2.8.2	Calcul de dose dans l'eau	113
4.2.8.3	Espace des phases de l'AIEA et Geant4-[mt]	114
4.2.8.4	Efficacité du calcul	115
4.3	Résultats	115
4.3.1	Évaluation de l'algorithme de reconstruction	115
4.3.2	Validation du calcul de dose	118
4.3.2.1	Précision du calcul de dose	118
4.3.2.2	Estimation de l'efficacité du calcul	125
4.4	Conclusion	125
5	Optimisation de la simulation Monte Carlo des faisceaux 6/10 MV : Élaboration et développement sous Geant4-[mt] d'un modèle théorique du collimateur multilames	127
5.1	Introduction	127
5.2	Matériels et méthodes	128
5.2.1	Modèle du faisceau de photons	128
5.2.1.1	Source de rayonnement primaire	130
5.2.1.2	Source (1) de rayonnement diffusé	130
5.2.1.3	Source (2) de rayonnement diffusé	132
5.2.2	Modélisation analytique du collimateur multilames	140
5.2.3	Validation	144
5.2.4	Évaluation de l'efficacité	145
5.2.5	Paramètres de simulation	145
5.3	Résultats	146
5.3.1	Qualité de reconstruction	146
5.3.2	Calcul de dose	148
5.3.3	Évaluation de l'efficacité	153
5.4	Conclusion	153
	Conclusion	155
	Annexe A γ index	157
A.1	Concept	157
A.2	Interprétation	158
	Annexe B Outils d'analyse statistique	160

B.1	Test χ^2	160
B.1.1	Introduction	160
B.1.2	Loi de χ^2	160
B.1.3	Procédure du test	161
B.2	Incertitude statistique	161
B.2.1	<i>Batch method</i>	161
B.2.2	<i>History by history method</i>	162
Annexe C Publications et communication		163
C.1	Publications en revues indexées	163
C.2	Communication par Poster	163
Annexe Bibliographie		164

Table des figures

1.1	Configuration de l'accélérateur linéaire proposée par <i>G. Ising</i> en 1924 et améliorée après par <i>R. Wideröe</i> en 1928.	5
1.2	Couplage de cavités raisonnantes dans les accélérateurs linéaires médicaux.	7
1.3	Production d'un faisceau de photons/électrons par un accélérateur linéaire médical.	8
1.4	Transfert d'énergie des photons primaires aux électrons de la matière traversée.	10
1.5	Énergie absorbée à l'intérieur de la sphère, déposée par les électrons mis en mouvement à l'extérieur et à l'intérieur de la sphère.	11
1.6	Variation en profondeur du <i>Kerma</i> et de la dose déposée par un faisceau de photons dans un milieu homogène.	12
1.7	Condition de mesure du rendement en profondeur $R(c, z)$ dans un fantôme d'eau. La distance source-surface du fantôme ($DSP=100$ cm) est maintenue constante pendant la mesure, seule la distance source-détecteur varie pendant l'acquisition.	14
1.8	Variation du profile de dose en fonction de la position latérale dans un fantôme d'eau.	15
1.9	Condition de mesure du rapport tissu air. La distance source point de mesure et la taille du champ d'irradiation sont maintenues constantes. (a) : mesure de la dose absorbée à la profondeur z ; (b) : mesure de la dose dans l'air dans les mêmes conditions.	16
1.10	Condition de mesure du rapport tissu fantôme. La distance source chambre d'ionisation et la taille du champ d'irradiation sont maintenues constantes, seule la profondeur change d'une mesure à l'autre.	17
1.11	Effet de la modulation d'intensité sur un profile de dose homogène. (a) : profile de dose sans modulation. (b) profile de dose modulé.	18
1.12	Discrétisation de la trajectoire du bras d'irradiation en plusieurs points de contrôle uniformément espacés.	20
1.13	Dose au point P dans un milieu homogène en fonction des doses aux points de mesures $P_{i,j}$. (x, z) représente les coordonnées Cartésiennes du point de calcul P ; les points $P_{i=\{1,2\},j=\{1,2\}}$ ont des valeurs de dose connues. Une triple interpolation linéaire permettra de restituer la dose au point P à partir des doses aux points $P_{i=\{1,2\},j=\{1,2\}}$	26
1.14	Effet de l'obliquité sur la dose au point P' situé à la même profondeur d que le point P . Le point P' est supposé proche de l'axe du faisceau, sous une même profondeur d , le facteur d'atténuation reste inchangé.	27
1.15	Correction de l'effet de l'hétérogénéité sur la dose au point P , par la méthode de <i>Batho</i> pour un champ d'irradiation de taille A_d . Le point P se situe dans un milieu de masse volumique ρ_1 et au-dessous d'une structure de masse volumique ρ_2	29

1.16	Représentation de la dose au point P calculée par la méthode de superposition. La dose au point P est la somme de l'énergie déposée par les particules chargées mises en mouvement suite aux interactions des photons primaires ou diffusés dans un élément de volume distant du point P	30
1.17	Représentation d'une distribution de dose tridimensionnelle dans un fantôme d'eau calculée par la méthode <i>Pencil Beam</i> . La dose $D(x, y, z)$ en tout point du fantôme, est donnée par le produit de convolution du <i>kernel</i> K_{PB} et de la fluence énergétique des photons à la surface du fantôme $\Psi(x, y)$	31
1.18	Représentation d'une distribution de dose tridimensionnelle dans un fantôme d'eau calculée par la méthode <i>Convolution/Superposition</i> . La dose $D(x, y, z)$ en tout point du fantôme, est donnée par le produit de convolution du <i>kernel</i> ponctuel K et de la fluence énergétique tridimensionnelle des photons dans le fantôme $\Psi(x, y, z)$	32
2.1	Histoire d'un électron primaire ayant subi des diffusions multiples sur sa trajectoire Seco & Verhaegen (2013)	45
2.2	Comparaison entre le parcours réel d'un électron en mouvement dans un milieu et le parcours estimé par la méthode de l'histoire condensée. La présence d'écart transversal nécessite l'application d'une correction au parcours de l'histoire condensée Seco & Verhaegen (2013)	48
2.3	Différence entre le parcours d'un électron calculé par la méthode <i>single scattering</i> et le parcours de l' <i>histoire condensée</i> , dans une géométrie contenant des hétérogénéités.	49
2.4	Ajustement automatique de la longueur du <i>step</i> de la particule chargée en fonction de la distance à la prochaine bordure.	50
2.5	Représentation schématique des composantes modélisées généralement pour simuler par la méthode de Monte Carlo la tête d'irradiation d'un accélérateur linéaire médical.	54
2.6	Tirage de la position r et de l'énergie E de 3.10^6 électrons primaires. (a) : Distribution spatiale uniforme de rayon maximal $r_{max} = 3$ mm. (b) Spectre <i>gaussien</i> d'une énergie moyenne $E_0 = 6$ MeV, $\sigma = 2\%$. E_0	55
2.7	Représentation de l'effet du filtre égalisateur sur la distribution spatiale des photons de freinage sous le collimateur primaire. (a) : fluence des photons issus directement de la cible de l'accélérateur ; (b) : fluence des photons de freinage atténués par le filtre égalisateur.	57
2.8	Géométrie du filtre égalisateur de l'accélérateur linéaire <i>Elekta Precise</i> . (a) : cône du faisceau 6 MV ; (b) : cône du faisceau 18 MV.	57
2.9	Visualisation OpenGL Woo et al. (1999) du collimateur secondaire ; mâchoires X/Y en gris, collimateur multi-lames en noir. (a) : Vue latérale, (b) : <i>beam eye view</i>	58
2.10	Représentation schématique de la simulation Monte Carlo de la production des photons de freinage avec et sans <i>bremsstrahlung splitting</i> . (a) : Simulation conforme au processus réel. (b) : Simulation avec <i>splitting</i> , production de cinq photons, chacun a un poids statistique $w = 1/5$	60
2.11	Interaction forcée d'un photon traversant un fantôme voxelisé.	61
3.1	Diagramme des catégories de classes contenues dans le code Geant4	68
3.2	Visualisation d'un détecteur complexe avec le module DAWNFILE utilisé dans Geant4 Agostinelli et al. (2003)	70
3.3	Le pas d'avancement (<i>step</i>) d'une particule en mouvement entre les deux points pre-step et post-step	71

3.4	diffusion d'un électron par effet Compton.	76
3.5	Les classes Geant4 de base, appelées par le noyau du code durant l'exécution. La zone en gris représente les classes définies par l'utilisateur. La complexité du code changera en fonction de la complexité de la source de particules primaires, la géométrie simulée et les grandeurs calculées.	85
3.6	Décomposition d'un calcul parallèle en k threads indépendants. Chaque application parallèle initialise le générateur de nombres aléatoires par une valeur appelée seed	88
4.1	Représentation simplifiée des variables décrivant une particule générée par le MSV en fonction des variables globales contenues dans le fichier d'espace des phases eq.4.1. La direction d'un photon primaire est calculée en fonction des coordonnées échantillonnées de la distribution spatiale de l'espace des phases et des coordonnées initiales du point de départ du photon, tirées de la distribution spatiale attribuée à la cible.	92
4.2	Représentation de la distribution radiale h_R et du spectre énergétique totale h_E d'un échantillon de 5×10^6 particules pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV ; (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	95
4.3	Représentation de la distribution angulaire h_ϕ et de la distribution δh_δ d'un échantillon de 5×10^6 particules pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (b, c) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV ; (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	96
4.4	Corrélation moyenne entre deux variables pour les trois faisceaux étudiés. (a, c, e) : énergie moyenne des photons en fonction de la position radiale sur le plan de l'espace des phases $\langle E \rangle (R)$; (b, d, f) : angle de diffusion moyen en fonction de l'énergie du photon $\langle \phi \rangle (E)$. (a, b) : faisceau 6 MV <i>Varian TrueBeam</i> ; (c, d) : faisceau 6 MV <i>Elekta Precise</i> ; (e, f) : faisceau 10 MV <i>Elekta Precise</i>	98
4.5	Corrélation moyenne entre deux variables pour les trois faisceaux d'irradiation étudiés. (a, c, e) : angle de diffusion moyen des photons en fonction de la position radiale sur le plan de l'espace des phases $\langle \phi \rangle (R)$; (b, d, f) : valeur moyenne de δ en fonction de l'angle de diffusion du photon $\langle \delta \rangle (\phi)$. (c, d) : faisceau 6 MV <i>Varian TrueBeam</i> ; (c, d) : faisceau 6 MV <i>Elekta Precise</i> ; (e, f) : faisceau 10 MV <i>Elekta Precise</i>	99
4.6	Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV et (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre les coordonnées cartésiennes x et y des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre les angles θ et ψ des photons de l'espace des phases.	102
4.7	Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV et (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre la position radiale R et l'angle de diffusion ϕ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre la position radiale R et la différence δ des photons de l'espace des phases.	103

4.8	Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV ; et (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre l'énergie E et l'angle de diffusion ϕ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre la position radiale R et l'énergie E des photons de l'espace des phases.	104
4.9	Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV et (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre l'énergie E et δ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre l'angle de diffusion ϕ et δ des photons de l'espace des phases.	105
4.10	Exemple des distributions en énergie des deux sources primaire/-diffusée et des distributions angulaires normalisées des photons de la source virtuelle de rayonnement diffusé, extraites de l'espace des phases du faisceau <i>Elekta Precise</i> 6 MV. (a) : spectres énergétiques d'indice angulaire $i_\phi = \{20, 120\}$; (b) : distribution angulaire des photons diffusés d'indice radial $i_R = \{20, 120\}$	107
4.11	Fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ pour l'accélérateur <i>Elekta Precise</i> . (a) : faisceau 6 MV ; (b) : faisceau 10 MV.	110
4.12	Fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ pour le faisceau 6 MV de l'accélérateur <i>Varian TrueBeam</i>	110
4.13	Méthode d'échantillonnage d'une particule à partir de la source virtuelle de rayonnement diffusé. i_R et i_ϕ sont les indices correspondants aux distributions 1D de l'angle de diffusion et de l'énergie respectivement h_ϕ et h_E	111
4.14	Visualisation OpenGL du collimateur secondaire modélisé. La dimension du champ d'irradiation à l'ioscentre est $10 \times 10 \text{ cm}^2$	113
4.15	Évaluation de la qualité de reconstruction du faisceau 6 MV du <i>linac Elekta Precise</i> par calcul des histogrammes résiduels eq.4.14. (a) : résidu de la corrélation entre la position radiale et l'énergie ; (b) : résidu de la corrélation entre l'angle de position θ et l'angle de direction planaire ψ ; (c) : résidu de la corrélation entre l'énergie et δ ; (d) : résidu de la corrélation entre la position radiale et δ ; (e) : résidu de la corrélation entre l'énergie et l'angle de direction ϕ ; (f) : résidu de la corrélation entre la position radiale et l'angle de direction ϕ	117
4.16	Comparaison entre les profils de dose dans l'eau du MSV et de l'espace des phases calculés à d_{max} et 10 cm, pour les champs $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 7 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV. (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	120
4.17	Comparaison entre les distributions de dose dans l'eau (à droite : rendement en profondeur sur l'axe ; à gauche : profils de dose à 20 cm) du MSV et des espaces des phases de l'AIEA pour les champs $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 7 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a, b) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV. (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	121
4.18	Variation de la DTA en fonction de la profondeur, pour les champs d'irradiation $20 \times 7 \text{ cm}^2$ (à droite) et $30 \times 30 \text{ cm}^2$ (à gauche). (a, b) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV. (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	122
4.19	Variation de la DTA en fonction de la profondeur, pour les champs d'irradiation $3 \times 3 \text{ cm}^2$ (à droite) et $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (à gauche). (a, b) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV ; (c, d) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV. (e, f) : <i>Elekta Precise</i> 10 MV	123

4.20	Vitesses d'exécution de Geant4 et Geant4-[mt] . (a) : évolution de la vitesse d'exécution de Geant4-[mt] en fonction du nombre de threads ; (b) : variation de la vitesse d'exécution de Geant4 et Geant4-[mt] en fonction du nombre total d'événements simulés.	125
5.1	Reconstruction de la direction d'une particule eq.4.1 en fonction des coordonnées de la position initiale $(x_{p/s}, y_{p/s}, z_{p/s})$ et du point d'impact de la particule avec l'espace des phases $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$	128
5.2	Visualisation OpenGL du collimateur multilames utilisé dans les simulations. (a) : vue latérale ; (b) : <i>beam eye view</i>	129
5.3	Reconstruction 3D de 4×10^4 points représentant la distribution spatiale des particules sur la surface interne du collimateur primaire et la base du filtre égalisateur.	132
5.4	Géométrie et positionnement du collimateur multilames entre le plan de l'espace des phases et le plan de détection des particules.	133
5.5	Représentation graphique du pourcentage simulé des rayonnements diffusés et des fonctions d'ajustement correspondantes en fonction de la taille du champ d'irradiation pour <i>Elekta Precise</i> 6/10 MV et <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV respectivement. (a,c,e) : rayonnement total ; (b,d,f) contributions des photons ($P_S^{h\nu}$), électrons ($P_S^{e^-}$) et positrons ($P_S^{e^+}$).	134
5.6	Représentation graphique de la fonction d'ajustement des spectres en énergie simulés des particules diffusées à travers un champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$ pour les faisceaux <i>Elekta Precise</i> 10 MV (à droite) et <i>Elekta Precise</i> 6 MV (à gauche). Les densités de probabilité sont normalisées par l'énergie totale des particules diffusées. (a,b) : spectre de photons dont le pic visible correspond aux photons d'annihilation ; (c,d) : spectre électrons et (e,f) : spectre positrons.	135
5.7	Représentation graphique de la fonction d'ajustement des spectres en énergie simulés des particules diffusées à travers un champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$ pour le faisceau <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV. Les densités de probabilité sont normalisées par l'énergie totale des particules diffusées. (a) : photons ; (b) : électrons et (c) : positrons.	136
5.9	Spectres en énergie des particules diffusées par le collimateur secondaire pour quatre champs d'irradiation $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 20 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a) : photons ; (b) : électrons ; (c) : positrons	140
5.10	Fonction filtre collimateur. (a) : différentes fonctions composant la FFC. (b) : FFC, les paramètres pour cette illustration sont $A_1 = 1$, $A_0 = 0.98$, $x_i^a = -60 \text{ mm}$, $w_i^a = 5 \text{ mm}$, $x_i^b = 20 \text{ mm}$, $w_i^b = 4.5 \text{ mm}$ et $c_{tr} = 0.02$	142
5.11	Collimation de la fluence de particules dérivée de l'espace des phases. (a) : Subdivision de la carte de fluence en deux régions, R_1 et R_2 . (b) : projections sur le plan de l'espace des phases en fonction des paramètres géométriques.	143
5.12	Reconstruction de l'espace des phases du faisceau <i>Elekta Precise</i> 6 MV à l'isocentre. (a) : spectre énergétique total h_E normalisé par le nombre total de particules simulées. (b) : distribution de l'angle de diffusion h_ϕ normalisée par le nombre total de particules simulées. (c) : énergie moyenne des photons $\langle E \rangle (R)$ en fonction de la position radiale. (d) : angle de diffusion moyen des photons $\langle \phi \rangle (E)$ en fonction de l'énergie de la particule.	147

5.13	Distribution de dose du faisceau <i>Elekta Precise</i> 6 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.	149
5.14	Distribution de dose du faisceau <i>Elekta Precise</i> 10 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.	150
5.15	Distribution de dose du faisceau <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.	151
5.16	Carte de fluence du champ d'irradiation modulé utilisé dans la validation du modèle de faisceau. (a) : fluence de l'espace des phases de l'AIEA. (b) : fluence reconstruite avec le modèle élaboré.	152
5.17	Distribution de dose correspondante au champ de modulation d'intensité fig.5.16. (a,c) courbes de profile de dose à 6 cm de l'axe du faisceau; (b,d) rendement en profondeur à l'axe du faisceau. (a,b) : <i>Elekta Precise</i> 6 MV; (c,d) : <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV.	152
A.1	Adaptation automatique du γ_{index} en fonction de la région analysée. (a) : région à l'intérieur du champ d'irradiation, la différence spatiale est négligeable devant la différence de dose; (b) : région de la pénombre, la différence de dose est négligeable devant l'écart spatial.	158
A.2	Effet de la résolution sur le résultat de l'analyse γ_{index} de la distribution de dose au point de référence en question. (a) : tous les points se trouvent à l'extérieur de l'ellipse d'acceptabilité, donc la distribution évaluée n'a pas réussi le test γ_{index} pour ce point de référence; (b) : l'augmentation du nombre de points évalués a changé le résultat du test, nous observons que l'un des points est à l'intérieur de la surface d'acceptabilité.	159

Liste des tableaux

2.1	Variables enregistrées sur un fichier d'espace des phases suivant la norme de l'AIEA.	63
3.1	Intervalle d'incertitude sur la section efficace de l'effet photo-électrique de la bibliothèque EPDL97, pour les éléments gazeux et solides Cullen et al. (1997), Poon & Verhaegen (2005).	75
3.2	Énergie moyenne d'excitation de quelques éléments.	80
3.3	Valeurs de l'énergie moyenne d'excitation publiées dans le rapport 37 de l'ICRU et valeurs utilisées dans le modèle d'interaction électromagnétique <i>standard</i> de Geant4, pour sept matériaux.	81
4.1	Analyse statistique du spectre énergétique des particules enregistrées dans les espaces des phases étudiés.	94
4.2	Contribution de chaque source virtuelle, déduite de l'analyse de 5×10^6 particules tirées de trois espaces des phases étudiés.	108
4.3	Paramètres de la fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ figs.4.11 et 4.12 pour les faisceaux des l'accélérateur <i>Varian TrueBeam</i> et <i>Elekta Precise</i>	109
4.4	Évaluation de la qualité d'ajustement de la distribution de δ , par le calcul du χ^2 et du coefficient de détermination R^2	109
4.5	Analyse des histogrammes de différence normalisée calculés à l'isocentre. Le pourcentage de canaux inférieurs à 3%, 5% et 10% est calculé pour chaque combinaison. (*) <i>Varian TrueBeam</i> 6 MV; (**) <i>Elekta Precise</i> 6 MV; (***) <i>Elekta Precise</i> 10 MV.	116
4.6	Analyse γ_{index} des courbes de profile de dose $P^{(*)}$ à d_{max} , 10 cm et 20 cm de profondeur et du rendement en profondeur $R^{(**)}$ sur l'axe du faisceau. Le pourcentage de points passant les critères 3%/3 mm et 2%/3 mm est calculé pour chaque champ d'irradiation et énergie de faisceau.	118
4.7	Analyse de la DTA dans la région du <i>build-up</i> pour différentes tailles de champ d'irradiation et énergies nominales de faisceau.	124
5.1	Paramètres d'ajustement des fonctions $P_S^T(x)$, $P_S^{h\nu}(x)$, $P_S^{e^-}(x)$ et $P_S^{e^+}(x)$ eq.5.9 pour les trois faisceaux de photons évalués fig.5.5.	136
5.2	Paramètres d'ajustement des distributions $P_{h\nu}(E)$, $P_{e^-}(E)$ et $P_{e^+}(E)$ pour les faisceaux de photons <i>Elekta Precise</i> 6/10 MV fig.5.6.	137
5.3	Paramètres d'ajustement des distributions spatiales (eq.5.13) des particules diffusées pour les champs d'irradiation 4×4 cm ² et 25×25 cm ² , pour les trois faisceaux de photons évalués.	139
5.4	Composantes du modèle de faisceau de photons et contributions respectives. (*) : collimateur primaire; (**) : filtre égalisateur.	140
5.5	Moyenne et écart type de la distribution de différence normalisée pour les trois faisceaux de photons étudiés.	146

5.6	Moyenne et écart type de la distribution d'erreur relative pour les trois faisceaux de photons étudiés.	147
5.7	Évaluation des distributions de dose par analyse γ_{index} 3D. Pourcentage de points passant avec succès les critères 2%/2 mm et 3%/3 mm calculé pour chaque champ d'irradiation et énergie nominale de faisceau.	148
5.8	Efficacité de calcul du modèle de faisceau de photons élaboré en fonction du débit de fluence.	153

Liste des abréviations

AAPM	Association Américaine des Physiciens en Médecine.
AIEA	Agence Internationale de l'Énergie Atomique.
CAO	Conception Assistée par Ordinateur.
CERN	Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire.
CLHEP	Computing Library for High Energy Physics.
CSDA	Continious Slowing Down Approximation.
DRDC	Detector Research and Development Committee.
DSP	Distance Source Peau.
DTA	Distance To Agreement.
EADL	Evaluated Atomic Data Libray.
EEDL	Evaluated Electron Data Libray.
EPDL97	Evaluated Photon Data library.
EPID	Electronic Portal Imaging Device.
FEC	Fonction Filtre du Collimateur.
FFT	Transformée de Fourier Rapide.
Geant4	Geometry And Traking 4.
HF	Haute Fréquence.
ICRU	Commission Internationale des Unités et Mesures Radiologiques.
IMAT	Arc-Thérapie avec Modulation d'Intensité.
KEK	The High Energy Accelerator Research Organization.
Kerma	Kenitic Energy Realesed per unit Mass.
LHC	Grand Collisionneur de Hadrons.
linac	Accélérateur Linéaire de particules.
LLNL	Lawrence Livermore National Laboratory.
MC	Monte Carlo.
MSM	Modèle de Sources Multiples.
MSV	Modèle de Sources Virtuelles.
NIST	National Institute of Standards and Technology.
OpenGL	Open Graphics Library.
RC3D	Radiothérapie Conformationnelle en 3 Dimensions.
RCMI	Radiothérapie Conformationnelle par Modulation d'Intensité.
RMSE	Root Mean Square Error.
RTA	Rapport Tissu Air.
RTF	Rapport Tissu Fantôme.
SPT	Système de planification de traitement.
TERMA	Total Energy Released Per Mass Unit.
TLC	théorème de la Limite Centrale.
TM	Transverse Magnétique.

Introduction

La radiothérapie est devenue l'une des modalités les plus utilisées pour traiter les pathologies cancéreuses, son principe consiste à détruire la tumeur sous l'effet de l'interaction des rayonnements ionisants avec le volume irradié. En radiothérapie externe, des faisceaux de photons ou de particules chargées de différentes énergies, sont générés par des accélérateurs linéaires ([linac](#)) ou circulaires (cyclotron) [Van Dyk & Van Dyk \(1999\)](#). Le type du faisceau est défini en fonction de la profondeur et de la taille du volume à traiter.

Une optimisation de la distribution de dose permettra de définir le meilleur plan de traitement couvrant le volume cible tout en épargnant les organes à risque avoisinants [Jones \(1994\)](#). Les paramètres du plan de traitement sont calculés avec des logiciels dédiés appelés systèmes de planification de traitement ([SPT](#)). La majorité des algorithmes analytiques implémentés sur ces systèmes pour faire le calcul de dose, sont très performants en matière de temps d'exécution sur une machine, cependant, les incertitudes observées peuvent être nettement supérieures à la limite tolérable dans certaines conditions liées aux dimensions du champ d'irradiation ou à l'hétérogénéité du milieu irradié [Paelinck et al. \(2005\)](#).

En revanche, la méthode de Monte Carlo ([MC](#)) basée sur l'échantillonnage de variables aléatoires constitue une bonne alternative pour améliorer la précision. Cette approche permet d'estimer la distribution de dose du faisceau de rayonnement, par le calcul de l'énergie moyenne déposée dans le volume d'intérêt, pour chaque particule primaire simulée. La difficulté majeure empêchant une large intégration des méthodes probabilistes dans les SPT, est liée au temps de calcul non adapté à l'usage clinique, ce qui représente un axe de recherche exploitable visant l'amélioration de l'efficacité et l'optimisation du calcul [Nahum \(2015\)](#).

La validation d'une simulation Monte Carlo "classique" d'un accélérateur linéaire se fait généralement suivant plusieurs étapes : (i) modélisation de la géométrie détaillée de chacune des composantes de la tête d'irradiation ; (ii) détermination des paramètres optimaux de simulation reproduisant fidèlement les caractéristiques du faisceau de particules ; (iii) optimisation de l'efficacité du calcul, généralement à travers l'utilisation des techniques de parallélisation, implémentation des méthodes dites de réduction de variances ou bien une combinaison des deux méthodes [Rodriguez Castillo \(2016\)](#).

L'élaboration d'un modèle MC dédié à la simulation des accélérateurs linéaires en

radiothérapie externe, permettant un calcul rapide, suffisamment précis, adaptable à une large gamme de qualité de faisceau et plusieurs machine de traitement, représente un saut qualitatif en matière de planification de traitement par calcul stochastique. Le formalisme de “modèle à sources virtuelles” peut fournir une solution à ce genre de problématique.

La première partie de ce travail consiste à présenter un modèle efficace en termes de temps d’exécution, capable de générer les faisceaux de photons des accélérateurs linéaires à électrons utilisés en radiothérapie externe. Les données d’entrées du modèle ont été extraites des espaces des phases de l’Agence Internationale de l’Énergie Atomique ([AIEA](#)), calculés au-dessus du collimateur multi-lames.

Le présent modèle se basera sur l’analyse des espaces des phases de plusieurs faisceaux de photons d’énergies différentes, pre-calculés et validés par une commission de spécialistes de l’AIEA [Capote \(2006\)](#). Un algorithme de reconstruction permettra de restituer le faisceau original. L’identification des paramètres de contrôle facilitera par la suite l’ajustement de la précision. La validation du modèle se fera par une étude de la conservation des propriétés du faisceau reconstruit comparé au faisceau original de l’espace des phases, ensuite une évaluation finale de la distribution de dose du modèle élaboré est effectuée. La version basique du modèle est composée de deux sources distinctes, une source de photons primaires et une source de photons diffusés. La reconstruction du faisceau est effectuée toujours au-dessus du collimateur multi-lames.

La deuxième partie du travail consiste à améliorer l’efficacité du modèle initial afin de le tester pour un calcul de modulation d’intensité. La version sophistiquée décomposera le faisceau d’irradiation en trois sources élémentaires, une source de photons primaires, une source de photons diffusés et une source de contamination représentant les particules provenant de l’interaction du faisceau avec le collimateur secondaire. La collimation du faisceau se fera pour cette version par une fonction mathématique élaborée pour cet objectif particulier. Cette fonction permettra d’émuler l’effet des mâchoires et des lames du collimateur sur la fluence résultante et d’éviter le transport de particules pour moduler le faisceau. En conséquence, le temps de simulation est considérablement réduit tout en conservant une précision comparable à celle d’une simulation complète de la tête d’irradiation d’un accélérateur linéaire médical.

Le présent modèle a été testé avec le code de transport de particules [Geant4](#) et a été validé pour : des champs d’irradiation réguliers de différentes tailles, sous plusieurs profondeurs ; des champs irréguliers collimatés et un champ de modulation d’intensité. La validation du modèle a été effectuée pour les faisceaux de deux accélérateurs linéaires *Elekta Precise* et *Varian TrueBeam* respectivement pour les énergies nominales 6 MV/10 MV et 6 MV.

Chapitre 1

Fondements physiques et concepts de base en radiothérapie externe

1.1 Introduction

Les premiers mois qui ont succédé à la découverte des Rayons X par le physicien allemand Röntgen [ROENTGEN \(1959\)](#), ont connu les premières tentatives visant à manipuler les rayonnements ionisants pour le diagnostic et la thérapie. Au début les traitements se basaient sur l'utilisation de sources radioactives de rayonnement γ et de particule β , montrant des limites liées à la décroissance radioactive et à l'énergie des particules émises. Quelques années plus tard, les techniques d'accélération de particules utilisées en physique nucléaire fondamentale, ont été adaptées par la suite pour générer des faisceaux d'électrons à usage thérapeutique. Nous nous limiterons dans cette partie aux techniques de génération de faisceaux de photons produits par des accélérateurs linéaires d'électrons.

1.2 Aperçu historique

Avant le développement des accélérateurs linéaires médicaux durant les années 1970, la seule méthode existant à l'époque pour produire un faisceau de photons ionisants était les tubes à rayon X. L'énergie des photons générés par ces dispositifs varie de 50 keV à 150 keV. Cette gamme d'énergie n'étant suffisante que pour le traitement des localisations superficielles, l'amélioration de l'efficacité du traitement en profondeur ne deviendra possible que lorsque l'énergie du faisceau atteindra l'ordre du MeV. Cependant, l'installation de tube à rayon X alimenté par des générateurs de tension produisant des différences de potentiel de l'ordre du MV, était financièrement très coûteuse et difficilement réalisable du point de vue technique.

Parallèlement, le radioisotope du Radium ²²⁶Ra, était l'unique source de rayonnement naturel utilisée en radiothérapie. La chaîne de désintégration de ce noyau donne plusieurs rayonnements γ avec des énergies de l'ordre du keV, il est utilisé principalement en curiethérapie, mais sa faible abondance dans la nature rendait son prix

extrêmement cher. De plus, sa longue période ainsi que l'apparition de son descendant radioactif gazeux le Radon ^{222}Rn de 100% d'abondance isotopique issue suite à la première désintégration α , constituait un sérieux problème de Radio-protection.

Durant les années 1940, l'invention du réacteur nucléaire au cours de l'élaboration du projet *Manhattan*, a facilité la production artificielle de la matière radioactive. Le Cobalt 60 instable ^{60}Co obtenu suite à une réaction de capture neutronique par le ^{59}Co stable, représente l'exemple typique de ce genre d'applications eq.1.1. C'est un émetteur de deux rayonnements γ de 1.17 et 1.33 MeV.



La décroissance de l'activité d'une source de ^{60}Co en fonction du temps exigeait une substitution périodique, ainsi que l'énergie limitée des photons émis, représentaient des inconvénients majeurs qui ont poussé les chercheurs à développer des alternatives durables, plus efficaces et permettant un meilleur contrôle du faisceau d'irradiation.

1.3 Accélérateur linéaire

Les accélérateurs linéaires d'électrons génèrent des faisceaux d'une énergie supérieure à 1 MeV. En mode électron, le faisceau primaire est mono-énergétique, commençant de 4 jusqu'à 25 MeV [Mayles et al. \(2007\)](#). Un faisceau d'électrons est souvent utilisé pour irradier les localisations superficielles. En mode photons, le faisceau résultant est produit par freinage des électrons primaires à travers une cible composée d'un matériau dense.

1.3.1 Particule chargée et force de Lorentz

Cette force est à l'origine des principes de focalisation et d'accélération des particules chargées placées dans un champ électromagnétique. La force de Lorentz s'exprime en fonction de la charge q de la particule, de sa vitesse v et des composantes du champ électromagnétique $\vec{E}$ et $\vec{B}$ dans lequel elle est mise mouvement eq.1.2.

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \quad (1.2)$$

La composante électrique de cette force accélère les particules chargées, cependant la composante magnétique est utilisée pour la déviation de la trajectoire dans l'objectif de focaliser le faisceau.

1.3.2 Accélération de particules

La technique se montrant la plus efficace pour accélérer les particules chargées a été proposée par Ising et Windröe [Wideröe \(1928\)](#), l'accélération se fera par le champ électromagnétique à l'intérieur d'une section linéaire. La forme basique de cet accélérateur contenait une série de cavités cylindriques de longueurs croissantes, branchées

à un générateur sinusoïdal de Haute Fréquence (HF) fig.1.1. La tension V appliquée au système en fonction du temps t s'écrit :

$$V(t) = \Delta V \cdot \sin(\omega t + \phi_s) \quad (1.3)$$

ΔV est la différence de potentiel maximale entre deux cavités adjacentes.

$\omega = 2\pi f$ est la pulsation du signal de fréquence f .

ϕ_s est la phase de la machine.

Le champ électrique à l'intérieur des cavités en cuivre étant toujours nul, chaque particule lors de son passage par un interstice, gagne une énergie égale à :

$$|q| \Delta V \cdot \sin(\phi_s) \quad (1.4)$$

L'effet de l'accélération est conditionné par une synchronisation entre la valeur du champ électrique qui devrait être positive et la position d'une particule dans la section accélératrice. Le gain continu en vitesse exige l'augmentation de la longueur des cavités au fur et à mesure. La particule quitte une cavité avec un retard égale à la moitié de la période de l'onde porteuse, donc nous pouvons déduire que la longueur L_i de la i^{ieme} cavité peut s'écrire sous la forme :

$$L_i = \frac{1}{2} \beta_i \cdot c \cdot T \quad (1.5)$$

β_i est la vitesse réduite de la particule dans la i^{ieme} cavité.

c la célérité d'une onde électromagnétique dans le vide.

T est la période de l'onde HF.

Cette configuration est encore utilisée de nos jours en tant qu'injecteur de particules dans les accélérateurs d'ions lourds.

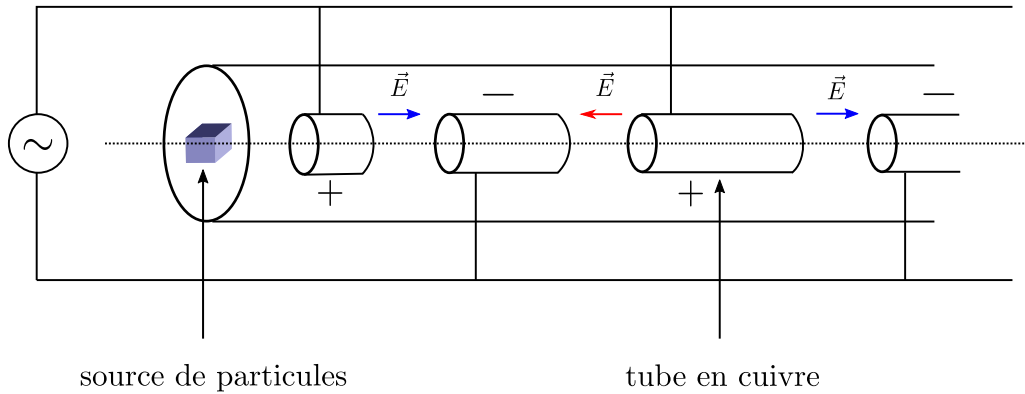


FIGURE 1.1: Configuration de l'accélérateur linéaire proposée par *G. Ising* en 1924 et améliorée après par *R. Wideröe* en 1928.

Pour des particules légères telles que les électrons, ces accélérateurs sont limités et ne permettent pas d'atteindre des énergies élevées de l'ordre du MeV. Les tubes doivent

avoir des longueurs d'une dizaine de mètres, par conséquent la longueur de la section accélératrice devient énorme. Pour garder une taille raisonnable de la machine, l'astuce consistait à augmenter la fréquence de l'onde HF. Une dissipation énorme d'énergie est induite lors du transport d'une onde HF le long d'un tube en cuivre, pour résoudre ce problème la solution consiste à utiliser des guides d'ondes appelés "cavités raisonnantes", permettant la réflexion du rayonnement et une conservation de son énergie.

1.3.3 Guide d'ondes

Les cavités sans limite axiale sont appelées guides d'onde cylindrique, leurs parois métalliques reflètent les ondes électromagnétiques. Les équations de *Maxwell* dans une cavité cylindrique s'écrivent sous la forme :

$$\text{div}(\vec{E}) = \text{div}(\vec{B}) = 0 \quad (1.6)$$

$$\vec{\text{rot}}(\vec{E}) = -j\omega\vec{B} \quad (1.7)$$

$$\vec{\text{rot}}(\vec{B}) = -j\omega\epsilon\mu\vec{E} \quad k_0 = \sqrt{\epsilon\mu}\omega = \frac{\omega}{c} \quad (1.8)$$

$\vec{E}$, $\vec{B}$ sont respectivement les champs électrique et magnétique.

ϵ , μ sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du milieu de propagation.

k_0 est le module du vecteur d'onde.

L'expression du rotationnel des expressions 1.7, 1.8 donnent les équations de propagation de l'onde électromagnétique dans le milieu considéré :

$$-\nabla^2\vec{B} = \omega^2\epsilon\mu\vec{B} \quad (1.9)$$

$$-\nabla^2\vec{E} = \omega^2\epsilon\mu\vec{E} \quad (1.10)$$

La classe d'ondes montrant un intérêt pour l'accélération des particules est caractérisée par une composante longitudinale de champ électrique non-nulle. Ce sont donc des ondes Transverses Magnétiques (TM). La détermination de la composante E_z du champ électrique se fera par le développement des équations de propagation en coordonnées cylindrique sur l'axe (OZ) :

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial E_z}{\partial r} = (k^2 - k_0^2) E_z \quad (1.11)$$

La solution de l'équation différentielle 1.11 est donnée par la fonction suivante :

$$E_z(r, z, t) = E_0 J_0 r \sqrt{k_0^2 - k^2} \exp(j(\omega t - kz)) \quad (1.12)$$

k_0 et k sont respectivement le module du vecteur d'onde à l'extérieur et à l'intérieur du guide d'onde.

J_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro.

Il existe une fréquence, appelée fréquence de coupure ω_c 1.14, en dessous de laquelle

l'onde ne se propage pas, en d'autres termes la dispersion k de l'onde est nulle pour cette fréquence 1.13.

$$k = \sqrt{\epsilon\mu\omega^2 - \left(\frac{x_n}{R_0}\right)^2} \quad (1.13)$$

$$k = 0 \Rightarrow \omega_c = \frac{x_n}{\sqrt{\epsilon\mu}R_0} \quad (1.14)$$

x_n peut accepter différentes valeurs en fonction du mode de propagation de l'onde. R_0 étant le rayon de la cavité résonnante.

Pour assurer l'accélération dans le guide il faut que chaque particule reste en phase avec le champ électrique, chose qui ne peut se produire que si la vitesse de la particule, initialement inférieure à la célérité de la lumière c , est égale à la vitesse de l'onde électromagnétique. Pour ralentir suffisamment la vitesse de phase, l'une des techniques utilisées consiste à introduire des iris à l'intérieur du guide d'onde. L'introduction d'iris dans un guide d'onde lisse, crée une séquence de cavités résonnantes couplées. La dimension de ces iris permettra d'ajuster la vitesse de phase à la valeur souhaitée.

1.3.4 Couplage de cavités résonnantes

Le couplage de cavités résonnantes est associé aux accélérateurs dont la longueur est décrite par l'équation 1.5. Ce couplage permettra également de définir un seul point d'alimentation par onde HF, pour toute la section accélératrice.

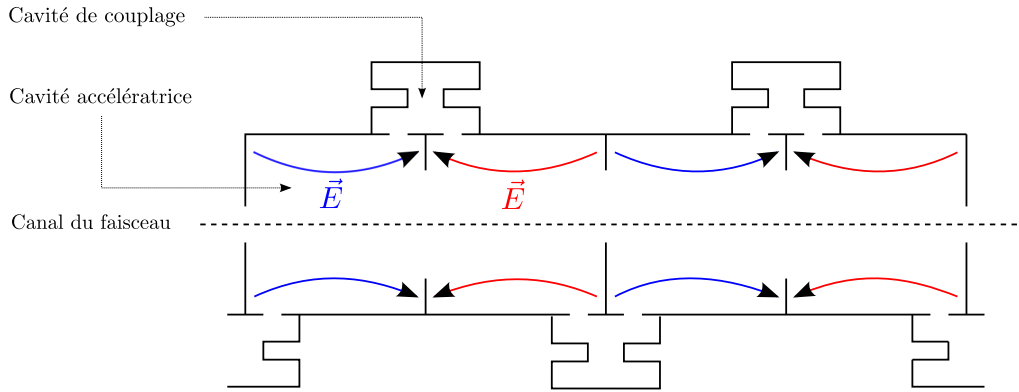


FIGURE 1.2: Couplage de cavités résonnantes dans les accélérateurs linéaires médicaux.

La vitesse de propagation de l'énergie électromagnétique, appelée vitesse de groupe V_g , s'écrit sous la forme :

$$V_g = -\omega_0 d \frac{\sin(\mu_p)}{\sqrt{1 - 2K(1 - \cos(\mu_p))}} \quad (1.15)$$

ω_0 est la fréquence de résonance des cavités sans couplage.

d est la longueur de la cavité résonnante.

$\mu_p = \pi m / (N - 1)$ est le mode de propagation, $m = \{0, 1, 2, \dots, N - 1\}$.

K est la constante de couplage donnée par le rapport du couplage capacitif C_c et la capacité C .

Nous pouvons noter que la vitesse de groupe maximale est obtenue pour le mode $\pi/2$.

Les cavités de couplage à champs électrique nul distribuées de part et d'autre tout au long de l'axe du faisceau, minimisent les pertes moyennes d'accélération figure 1.2.

1.3.5 Génération des faisceaux d'irradiations

La sous-section suivantes décrivent les techniques de productions des faisceaux de photons et d'électrons mises en œuvre dans les accélérateurs linéaires médicaux, utilisés en radiothérapie externe.

1.3.5.1 Système de déviation et focalisation du faisceau

L'énergie du faisceau d'électrons mono-énergétique à la sortie de la section accélératrice fluctue en réalité autour d'une valeur moyenne. Pour corriger cette dispersion, des dispositifs magnétiques achromatiques, refocalisent le faisceau d'électrons à la sortie de la section accélératrice. L'intensité du champ moyen est calculée pour que les électrons d'énergie moyenne voient leur trajectoire maintenue à proximité du centre de l'aimant.

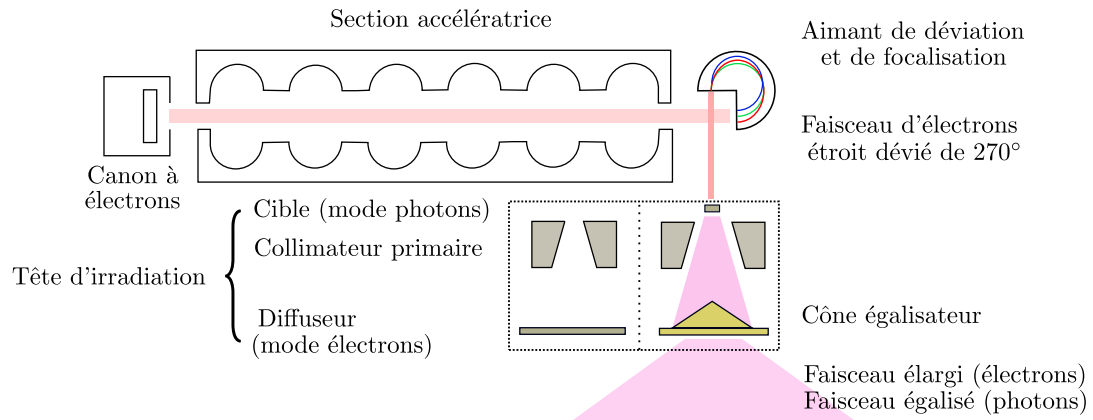


FIGURE 1.3: Production d'un faisceau de photons/électrons par un accélérateur linéaire médical.

Un électron d'énergie supérieure aura une trajectoire plus large, il pénètre dans la région où le champ est plus intense ce qui permet de le dévier plus efficacement et rapprocher son énergie de la valeur moyenne de la distribution totale. Inversement, une particule d'énergie plus faible verra au départ sa trajectoire plus fortement incurvée, mais elle arrive alors dans une région où le champ est plus faible, ce qui

va accroître son rayon de courbure. Dans la majorité des systèmes de déviation, la trajectoire de chaque électron est déviée d'un angle de 270° avant de franchir la tête d'irradiation de l'accélérateur linéaire fig.1.3.

1.3.5.2 Mode électrons

Les accélérateurs linéaires médicaux à électrons génèrent des faisceaux d'une énergie nominale de 4 à 25 MeV. En mode électrons, le faisceau à la sortie de la section accélératrice est très fin d'où l'appellation *pencil beam*. L'irradier d'une surface plus étendue nécessitera l'augmentation de la dispersion du faisceau. La technique la plus simple pour augmenter la divergence consiste à placer une série de plusieurs plaques métalliques pour exploiter l'effet de la diffusion sur la forme du faisceau, la première plaque est de densité élevée.

1.3.5.3 Mode photons

le faisceau primaire à la sortie de la section accélératrice est orienté vers la cible grâce à un système de déviation fig.1.3. Le faisceau primaire représente les photons *bremsstrahlung* générés suite au freinage des électrons primaires par les noyaux du matériau cible d'une densité élevée. La distribution spatiale résultante des photons est plus intense au centre chose qui n'est pas conforme aux exigences d'utilisation thérapeutique. L'homogénéisation de la fluence est effectuée en mettant une composante supplémentaire de forme conique sur la trajectoire du faisceau. L'atténuation des photons permettra d'avoir à la sortie de la fenêtre d'irradiation une fluence plus aplatie et mieux adaptée à l'usage médical. Les paramètres géométriques du cône égalisateur changent en fonction de l'énergie nominale du faisceau de photons généré.

1.4 Dosimétrie des faisceaux de photons

Lorsque la matière est traversée par un flux de photons ionisants, le dépôt d'énergie est effectué à travers plusieurs modes d'interactions. En dosimétrie, L'équilibre électronique qui est leur conséquence directe, est une notion très utilisée pour évaluer quantitativement l'énergie communiquée à une masse élémentaire, irradiée par un faisceau de photons. L'estimation de l'énergie déposée par unité de masse constitue l'objectif majeur pour lequel les méthodes de calcul dosimétrique et de prédiction ont été développées.

1.4.1 Énergie cinétique délivrée par unité de masse (Kerma)

Considérons une sphère élémentaire de rayon dr , de masse dm et de centre P , placée dans un milieu et irradiée par un faisceau de photons transportant l'énergie dw_e . Nous pouvons classer les photons quittant cette sphère en trois catégories :

- photons traversant le volume sans aucune interaction à l'intérieur.

- photons diffusés produisant des électrons par interaction avec la sphère, déposant par la suite toute leur énergie dans ce même volume.
- photons diffusés produisant des électrons par interaction avec la sphère, déposant partiellement leur énergie avant de quitter le volume.

Nous considérons dw_s l'énergie globale des photons sortants du volume élémentaire de la sphère fig.1.4.

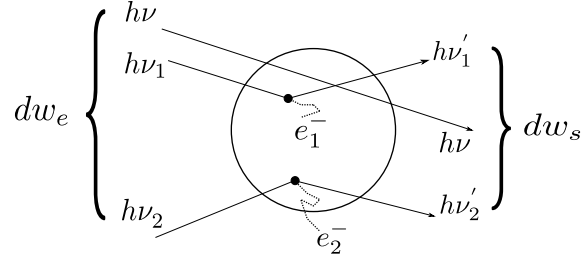


FIGURE 1.4: Transfert d'énergie des photons primaires aux électrons de la matière traversée.

$$dw_d = dw_e - dw_s \quad (1.16)$$

$$K = \frac{dw_d}{dm} \quad (1.17)$$

dw_d représente l'énergie totale transférée par les photons incidents aux électrons et déposée dans le volume de la sphère eq.1.16. Les électrons mis en mouvement communiquent leur énergie cinétique aux électrons des atomes constituant la sphère. Le quotient de la quantité dw_d par la masse élémentaire dm de la sphère eq.1.17 est appelée **Kerma** (*Kinetic energy released per mass unit*). Cette quantité correspond au transfert d'énergie à l'intérieur de la sphère quel que soit le devenir des particules mises en mouvement lors de ces transferts.

1.4.2 Dose absorbée

L'énergie cinétique dw_d transférée aux électrons peut être écrite en fonction de deux composantes, la première symbolise le transfert à l'extérieur de la sphère et la deuxième correspond au transfert à l'intérieur du volume. Nous définissons dw_a l'énergie absorbée à l'intérieur de la sphère à partir des électrons mis en mouvement à l'intérieur ou à l'extérieur du volume de la sphère élémentaire fig.1.5.

$$dw_a = dw_1 + dw_2 + dw_3 \quad (1.18)$$

dw_1 représente l'énergie élémentaire déposée dans la sphère par les électrons mis en mouvement à l'extérieur.

dw_2 : représente l'énergie élémentaire déposée par les électrons mis en mouvement à l'intérieur de la sphère mais qui ont assez d'énergie pour la quitter.

dw_3 : représente l'énergie élémentaire des électrons qui sont mis en mouvement dans la sphère et qui ont déposé la totalité de leur énergie dans cette dernière.

La dose absorbée $\bar{D}$ eq.1.19 n'est autre que l'énergie moyenne déposée par les particules chargées dans un élément de volume de masse élémentaire dm . Cette grandeur

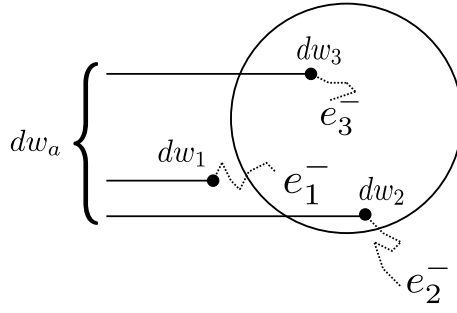


FIGURE 1.5: Énergie absorbée à l'intérieur de la sphère, déposée par les électrons mis en mouvement à l'extérieur et à l'intérieur de la sphère.

correspond donc à l'énergie déposée dans la sphère quel que soit le lieu de transfert initial de cette énergie.

$$\bar{D} = \frac{dw_a}{dm} \quad (1.19)$$

Vu que la dose est définie comme étant l'énergie des particules chargées (électrons) cédée par unité de masse, pour un faisceau d'électrons cette grandeur sera égale au produit du pouvoir d'arrêt massique pour une énergie considérée et le nombre d'électrons par unité de surface ayant cette énergie eq.1.20.

$$D = \int \left(\frac{S}{\rho} \right)_{coll} \cdot \Phi_e \cdot dE \quad (1.20)$$

$$\Phi_e = \frac{d^2 N}{dE da}$$

$\left(\frac{S}{\rho} \right)_{coll}$ le pouvoir d'arrêt massique d'une particule chargée en $[\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}]$, est l'énergie perdue par unité de longueur dans un matériau de masse volumique ρ , cette quantité permet d'estimer l'énergie déposée par un faisceau de particules chargées dans un milieu de densité ρ en fonction du spectre énergétique du faisceau et du pouvoir d'arrêt correspondant à chaque énergie.

Φ_e la fluence différentielle en énergie des particules incidentes exprimée en $[\text{MeV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}]$, est le nombre de particules N ayant une énergie comprise entre E et $E + dE$ et passant à travers l'élément de surface élémentaire da .

Un raisonnement analogue permettra de remonter au calcul de la dose déposée par un faisceau de photons dans un milieu homogène. Nous considérons que la contribution des photons primaires et diffusés (la fraction d'énergie perdue par le rayonnement de freinage est très souvent négligée puisque la probabilité d'occurrence de cet événement est assez faible dans les milieux peu denses), la dose est égale au produit de la fraction d'énergie du faisceau incident transférée aux électrons du milieu de masse volumique ρ et de la fluence différentielle en énergie du faisceau :

$$D = (1 - g) \int \Phi_e \cdot E \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_E \cdot dE \quad (1.21)$$

$$\frac{\mu_{tr}}{\rho} = \frac{dE_{tr}}{E \cdot N} \cdot \frac{1}{\rho \cdot dl}$$

g : la fraction d'énergie cinétique des électrons, convertie en rayonnement de freinage.

$(\frac{\mu_{tr}}{\rho})_E$: le coefficient de transfert massique en énergie des photons d'énergie E .
 $\frac{dE_{tr}}{E \cdot N}$: la fraction d'énergie transférée à un milieu d'épaisseur dl et de masse volumique ρ .

1.4.3 Relation Kerma-Dose absorbée et notion d'équilibre électronique

Si on considère un élément de volume dV , de masse dm fig.1.5 irradié par un flux uniforme de photons, seule une partie de l'énergie du faisceau est effectivement absorbée dans le volume élémentaire du fait que la dimension du volume est inférieure à la portée des électrons dans ce milieu.

Lorsqu'un volume V , de masse m est irradié, l'équilibre électronique est établi à une profondeur z_{max} fig.1.6, qui correspond au dépôt de dose maximale. Pour toute profondeur $z_i \geq z_{max}$, le nombre d'électrons secondaires mis en mouvement à l'intérieur d'un élément de volume et qui vont continuer leur trajet pour déposer leurs énergies en profondeur est égal au nombre d'électrons pénétrant dans ce même volume élémentaire.

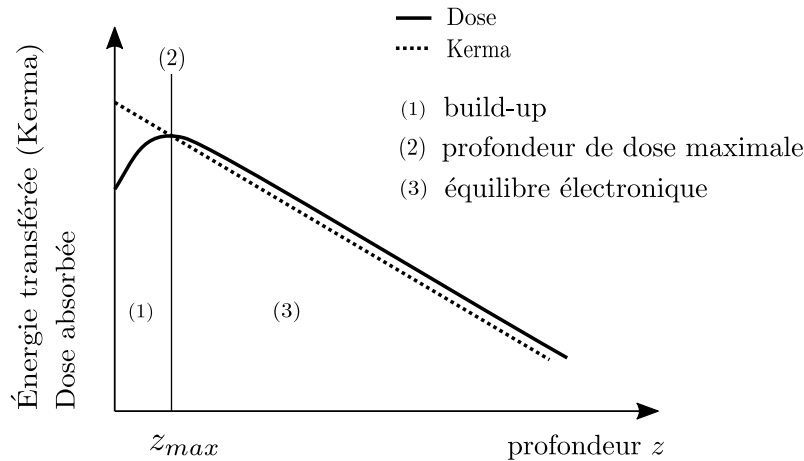


FIGURE 1.6: Variation en profondeur du *Kerma* et de la dose déposée par un faisceau de photons dans un milieu homogène.

La variation de la dose absorbée et du *Kerma* fig.1.6, peut être interprétée en termes du rapport $\frac{D}{K}$, définissant ainsi trois zones :

- zone (1) : le rapport $\frac{D}{K} < 1$, la dose est en croissance jusqu'à la profondeur z_{max} , *Kerma* est en diminution continue.
- zone (2) : Le rapport $\frac{D}{K} = 1$, à partir de ce point critique l'équilibre électronique est établi dans le milieu. Dans un élément de volume situé à une profondeur $z_i \geq z_{max}$ qui correspond à la profondeur de dépôt maximal de dose absorbée, la fluence de photons atténuée est égale à la fluence des électrons créés quittant le volume élémentaire.
- zone (3) : le rapport $\frac{D}{K} > 1$, la dose absorbée et la quantité *Kerma* diminuent parallèlement en fonction de la profondeur z du milieu traversé.

Lorsqu'un faisceau de photons de haute énergie pénètre dans le milieu, *Kerma* est maximale à la surface du milieu irradié où la fluence des photons est très importante,

puis décroît en fonction de la profondeur. Ce processus va engendrer une croissance de la fluence des électrons secondaires, donc une augmentation de la dose absorbée jusqu'à la profondeur z_{max} du dépôt de dose maximale. À ce niveau, l'égalité est réalisée entre la fluence des photons et la fluence des électrons secondaires mis en mouvement.

Pour que l'équilibre électronique s'établisse certaines conditions doivent être satisfaites :

- La masse de mesure dm doit se situer à l'intérieur d'une masse m plus grande.
- Le flux de rayonnement doit être uniformément distribué sur la surface irradiée.
- Le point de mesure est situé à une profondeur supérieure au parcours des électrons mis en mouvement dans ce milieu.

1.4.4 Grandeurs physiques mesurables en radiothérapie externe

Les anciens algorithmes de calcul de dose utilisent un ensemble de données expérimentales mesurées dans des fantômes généralement d'eau. Ces données permettent de connaître la distribution de dose en fonction des différentes variables pouvant influencer la dose calculée.

Ce type de données a été directement impliqué dans le calcul de dose dans les anciens systèmes de calcul. Actuellement, ils sont toujours d'une importance majeure, les caractéristiques mesurables du faisceau de particules propre à chaque machine sont impliqués dans les SPT afin faire l'ajustement nécessaire pour un calcul de dose adapté. La présente partie est consacrée pour définir quelques grandeurs mesurables impliquées dans le calcul de dose et la modélisation d'un faisceau de photons.

1.4.4.1 Rendement en profondeur

Par définition cette grandeur est égale au rapport entre la dose absorbée dans l'eau $D(z, c)$ en un point situé à la profondeur z sur l'axe d'un faisceau de dimension $c \times c$ cm² et la dose maximale dans le même milieu $D(z_{max}, c)$. La distance source surface du fantôme est maintenue constante pendant la mesure.

$$R(z, c) = \frac{D(z, c)}{D(z_{max}, c)} \quad (1.22)$$

La courbe de la dose en fonction de la profondeur fig.1.6 se décompose en trois régions distinctes ; zone d'accroissement de la dose (augmentation du flux des électrons secondaires) appelée *build-up* ; zone à partir de laquelle l'équilibre électronique est établi ; zone de décroissance exponentielle suivant la loi de l'atténuation d'un faisceau de photons.

Le rendement en profondeur dans un milieu d'eau dépend de trois paramètres ; l'énergie nominale du faisceau E ; la taille du champ d'irradiation c ; et la distance source-surface du milieu irradié.

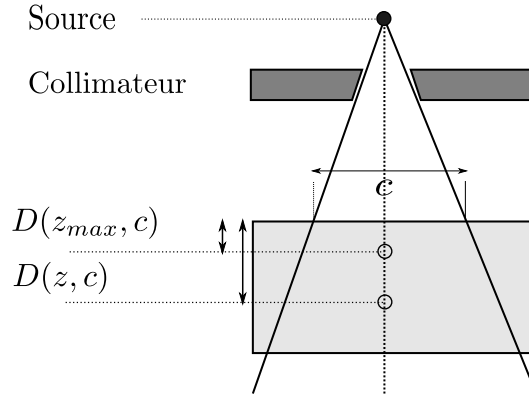


FIGURE 1.7: Condition de mesure du rendement en profondeur $R(c, z)$ dans un fantôme d'eau. La distance source-surface du fantôme ($DSP=100$ cm) est maintenue constante pendant la mesure, seule la distance source-détecteur varie pendant l'acquisition.

- **Influence de l'énergie du faisceau :** La profondeur du maximum de dose z_{max} augmente avec l'énergie. En effet, plus l'énergie du faisceau de photons est grande, plus la portée des électrons secondaires augmente. La dose déposée à des profondeurs inférieures à z_{max} varie inversement en fonction de l'énergie. En revanche, le dépôt de dose est plus important dès que l'équilibre électronique est établi.
- **Influence de la taille du champ d'irradiation :** La dose en un point sur l'axe du faisceau s'exprime en fonction de deux composantes ; la première symbolise la contribution des photons primaires de freinage issus directement de la tête de l'accélérateur, la deuxième représente la contribution du rayonnement diffusé du volume entourant le point de calcul. Plus la taille du champs d'irradiation augmente plus la taille du volume diffusant augmente ce qui entraîne en parallèle une amplification de la composante de la dose due au rayonnement diffusé.
- **Influence de la distance source-surface du milieu irradié :** Cette distance régit les conditions de dispersion géométrique du faisceau. La fluence de photons à la surface du fantôme varie suivant la loi de l'inverse carré de la distance [Spiers \(1941\)](#). Lorsque la distance source-surface diminue, le rendement en profondeur dans la région de l'équilibre électronique diminue légèrement.

La mesure du rendement en profondeur d'un accélérateur linéaire médical se fait dans un fantôme d'eau (cuve d'eau) fig.1.7. La chaîne de mesure est composée de deux chambres d'ionisations, la première se situe dans l'air pour la normalisation de la charge colletée, la deuxième est placée dans l'eau avec trois degrés de liberté, permettant un déplacement selon les trois axes de la cuve. Un logiciel d'acquisition permet de convertir le signal du détecteur en courbe rendement en profondeur. La distance source surface du fantôme de mesure est fixée pendant l'irradiation, seule la chambre d'ionisation se déplace sur l'axe (oz).

1.4.4.2 Profile de dose

Le profile de dose correspond à la variation de la dose selon le plan perpendiculaire à l'axe du faisceau. Cette grandeur est mesurée par le déplacement d'une chambre d'ionisation selon l'un des axes du champ d'irradiation (x ou y). Le profile de dose permet de contrôler l'homogénéité, la symétrie ainsi que la pénombre du faisceau de photons. La courbe de profile de dose se compose de trois régions distinctes fig.1.8.

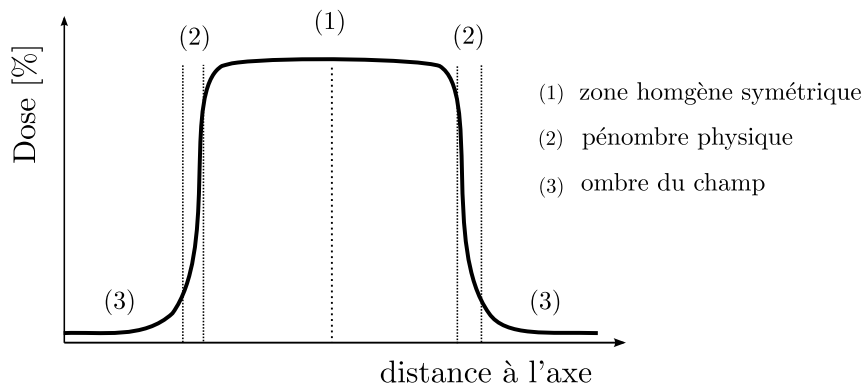


FIGURE 1.8: Variation du profile de dose en fonction de la position latérale dans un fantôme d'eau.

1. La zone (1) homogène et symétrique du champ est le résultat d'une filtration effectuée par le cône égalisateur présent au niveau de la tête d'irradiation, permettant d'égaliser la fluence de photons initialement intense sur l'axe d'irradiation. Le degré d'homogénéité et de symétrie est d'une influence particulière sur l'efficacité thérapeutique.
2. La zone (2) pénombre physique correspond à la région de diminution brutale de dose en fonction de la position sur l'un des deux axes (ox) ou (oy). La pénombre physique est la somme de trois types de pénombres indépendantes [Podgorsak \(2003\)](#) :
 - la première est la pénombre géométrique dont la largeur est une fonction des dimensions de la source primaire, de la distance collimateur-source et de la distance source-surface du milieu irradié (patient).
 - La deuxième est la pénombre de transmission du rayonnement à travers le collimateur, d'où l'appellation pénombre de transmission.
 - La troisième est la pénombre de diffusion, due à la diffusion des photons du faisceau suite à des interactions avec le collimateur, les limites de cette zone augmentent en fonction de la taille du champ d'irradiation et de la profondeur de mesure.
3. La zone (3) est appelée ombre du champ d'irradiation, due à l'atténuation de la fluence du faisceau par les différentes composantes du collimateur.

1.4.4.3 Rapport tissu air

Le Rapport Tissu Air ([RTA](#)) a été défini dans le rapport de N° 23 de la Commission Internationale des Unités et mesures Radiologiques ([ICRU](#)) comme étant le rapport

entre la dose absorbée dans un fantôme à une certaine profondeur par la dose absorbée mesurée au même point dans l'air. La masse de mesure doit avoir un volume suffisant pour établir l'équilibre électronique [White et al. \(1992\)](#) fig.1.9.

$$RTA(z, c) = \frac{D_{eau}(z, c)}{D_{air}(c)} \quad (1.23)$$

La mesure du RTA eq.1.23 par des chambres d'ionisation placée dans l'air est difficile expérimentalement surtout pour des champs d'irradiation très étroits, dans cette situation la masse de mesure peut avoir des dimensions supérieures à la taille du champ d'irradiation entraînant des perturbations liées à son large volume. Dans ce cas de figure la simulation Monte Carlo constitue une alternative fiable pour estimer cette grandeur.

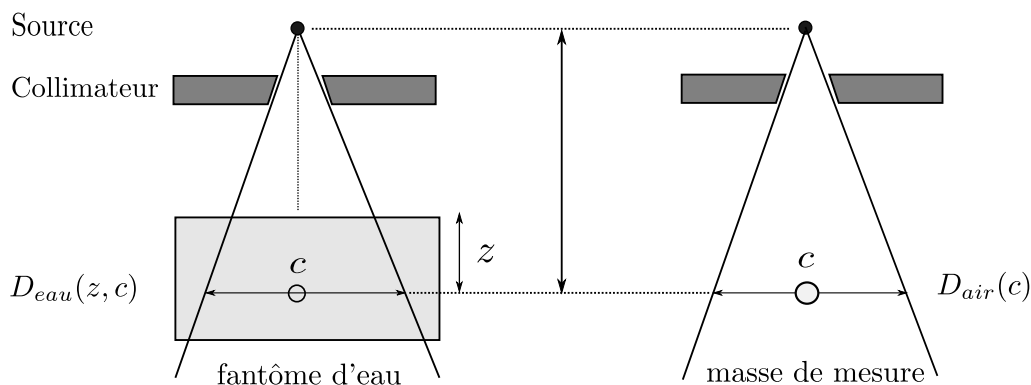


FIGURE 1.9: Condition de mesure du rapport tissu air. La distance source point de mesure et la taille du champ d'irradiation sont maintenues constantes. (a) : mesure de la dose absorbée à la profondeur z ; (b) : mesure de la dose dans l'air dans les mêmes conditions.

1.4.4.4 Rapport tissu fantôme

Le Rapport Tissu-Fantôme (**RTF**) (*tissu phantom ratio*) a été introduit par Johns en 1953 [Johns & Cunningham \(1983\)](#), dans le cas d'un traitement mono-isocentrique (la position de la région à traiter est fixée à l'iso-centre, pour les différentes angulations de la tête d'irradiation). Cette technique permet de minimiser les changements de position lors du traitement sous différentes incidences et donc permet de réduire considérablement les erreurs de positionnement induites éventuellement à chaque changement. Mais avant de mettre en place cette méthode il fallait introduire un facteur correctif de calcul mettant en évidence le changement de la distance source-peau qui varie en fonction de l'angle d'incidence, contrairement à l'ancienne méthode qui se base sur une DSP constante. Ce processus encombrant, a poussé les chercheurs à développer le concept du RTF qui est une grandeur dosimétrique plus représentative.

Le Rapport tissu-fantôme est défini par le rapport de la dose en un point sur l'axe, à la profondeur z dans un fantôme d'eau et la dose à la profondeur du maximum z_{max} . eq.1.24. La position de la chambre d'ionisation est toujours fixée à l'isocentre

pendant la mesure, uniquement la profondeur de mesure change fig.1.10.

$$RTF(z, c) = \frac{D_{eau}(z, c)}{D_{eau}(z_{ref}, c)} \quad (1.24)$$

Cette grandeur est une abstraction difficilement accessible par mesure expérimentale, elle est déduite en fonction d'autres grandeurs mesurables [Mayles et al. \(2007\)](#).

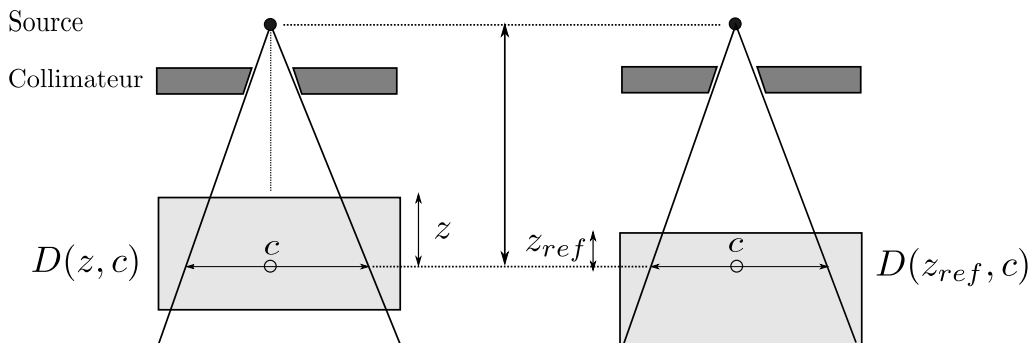


FIGURE 1.10: Condition de mesure du rapport tissu fantôme. La distance source chambre d'ionisation et la taille du champ d'irradiation sont maintenues constantes, seule la profondeur change d'une mesure à l'autre.

1.5 Techniques de traitements par un linac en mode photons

Les techniques de traitement se basant sur l'utilisation des faisceaux de photons générés par un linac ont connu une évolution continue et significative durant les trois dernières décennies. Dans les sous-sections qui suivent nous allons résumer dans l'ordre chronologique le principe de base de chacune des modalités qui ont marqué l'histoire de la radiothérapie par faisceaux de photons.

1.5.1 Radiothérapie conformationnelle 3D

L'objectif principal de la radiothérapie consiste à irradier le volume cible avec le faisceau de particules pour déposer suffisamment d'énergie tout en préservant les organes à risque avoisinants. Cet objectif était irréalisable avant l'arrivée de la radiothérapie conformationnelle 3D ([RC3D](#)).

Les anciennes techniques se basaient sur une définition manuelle de la région traitée à base des projections de radiographie standard, obtenues par un simulateur conventionnel. Les champs d'irradiation avaient des formes usuelles qui ne reproduisaient pas avec suffisamment de précision la géométrie de la tumeur, ce qui induisait une modeste efficacité de traitement. Quelques années plus tard et pendant les années 1990, la RC3D a bien profité du progrès scientifique et technique en imagerie tomographique par rayons X. Les coupes scanner acquises par cette modalité d'imagerie

ont permis une meilleure délimitation du volume cible sur ordinateur. Aussi bien la planification de traitement assistée par ordinateur a facilité le développement de nouvelles balistiques de traitement exploitant au mieux les degrés de liberté d'un accélérateur linéaire.

Le principe de base consiste à conformer la forme du faisceau de photons à la géométrie du volume irradié grâce à un collimateur multilames [Nunan \(1989\)](#), l'irradiation se fera sous différentes angulations [Schlegel & Mahr \(2007\)](#). La pondération de chaque faisceau, la configuration du collimateur multilames ainsi que l'énergie nominale du faisceau et le type de particules sont les principaux paramètres de contrôle permettant l'optimisation du plan de traitement.

1.5.2 Radiothérapie conformationnelle avec modulation d'intensité

En radiothérapie conformationnelle 3D la fluence particulaire du faisceau d'irradiation est relativement uniforme, la distribution de dose épouse parfaitement les géométries sphériques ou quasi-sphériques du volume irradié. Pour certaines localisations, la tumeur est de forme concave, une distribution de dose uniforme causera un surdosage du tissu sain entouré par le volume cible. Ce genre de problème a favorisé l'apparition d'une nouvelle technique plus innovante appelée radiothérapie conformationnelle par modulation d'intensité ([RCMI](#)) [Ma et al. \(2000\)](#).

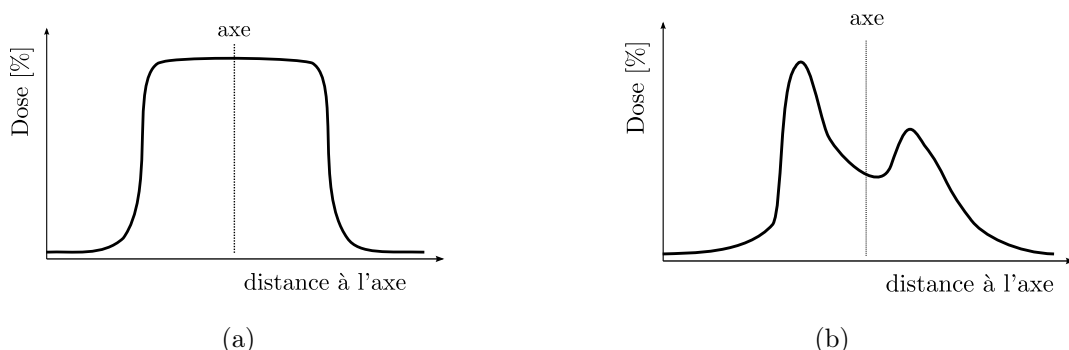


FIGURE 1.11: Effet de la modulation d'intensité sur un profil de dose homogène. (a) : profil de dose sans modulation. (b) : profil de dose modulé.

Contrairement à la technique précédente (RC3D), où les paramètres tels que la configuration du collimateur et la pondération du faisceau sont contrôlés et fixés par le physicien médical, en modulation d'intensité des algorithmes de calcul se basant sur l'optimisation détermineront ces variables. Le principe de l'optimisation consiste à transformer les contraintes d'irradiation cliniques en critères mathématiques combinés sous forme d'une fonction appelée "fonction objectif" [Shepard et al. \(2002\)](#), [Bortfeld \(2006\)](#).

Les contraintes modélisées par la fonction objectif sont décrites par des grandeurs physiques telles que les doses maximales tolérées aux organes à risques, ainsi que

par des grandeurs biologiques basées sur les notions de probabilité de contrôle tumorale traduisant la probabilité d'apparition de complications aux organes sains avoisinants. Ces algorithmes appliquent des processus itératifs utilisant la fonction objectif pour remonter à partir de la distribution de dose souhaitée à la configuration du collimateur qui modulera conformément la fluence de photons initialement homogène [Spirou & Chui \(1998\)](#) fig.1.11.

Cette technique permet de sculpter des isodoses couvrant la tumeur et épargnant le tissu sain. La modulation de la fluence de photons se fait par atténuation grâce au mouvement du collimateur multi-lames utilisé dans les accélérateurs linéaires depuis plusieurs années [Nunan \(1989\)](#). Nous distinguons deux modes d'irradiation en radiothérapie par modulation d'intensité, le *mode statique* et le *mode dynamique*. La fixation du bras de l'accélérateur durant l'irradiation est le point commun entre les deux techniques utilisées en RCMI.

1.5.2.1 Mode statique

Chaque champ d'irradiation est décomposé en plusieurs champs élémentaires appelés segments, à chaque segment correspond une configuration du collimateur multilames et une pondération de dose. La modulation de la fluence de photons pour ce mode se fait par la superposition discrète et séquentielle de la fluence de chaque segment élémentaire.

1.5.2.2 Mode dynamique

Le mode dynamique est appelé *Sliding window* [Convery & Rosenbloom \(1992\)](#), l'irradiation se fait de manière continue. La modulation de la fluence se fait par le balayage d'une fente formée par les lames du collimateur, dont les dimensions et la forme changent simultanément. La vitesse de balayage contrôlera le degré de modulation. La vitesse de déplacement de chaque lame limitera la résolution spatiale de la modulation [Yang \(2014\)](#).

1.5.3 Arc-thérapie avec modulation d'intensité

Le concept de l'arc-thérapie avec modulation d'intensité ([IMAT](#)) a été proposé en 1995 [Yu \(1995\)](#). Contrairement à la méthode basique proposée à l'époque et qui consiste à irradier le volume cible en mode rotationnel sans changer la configuration du collimateur, cette nouvelle méthode associe la modulation de la fluence à la rotation continue du bras de l'accélérateur, réduisant considérablement le temps de traitement, tout en assurant une meilleure conformation de la distribution de dose à la géométrie de la tumeur.

L'arc d'irradiation est défini par deux positions angulaires du bras, entre lesquelles l'irradiation est synchronisée avec le mouvement de rotation. L'irradiation tout au long de l'arc est discrétisée en plusieurs champs modulés appelés points de contrôles,

généralement espacés de 5 à 10 degrés Yu (1995), Earl et al. (2007). Chaque champ d'irradiation associé à un point de contrôle, est décomposé en plusieurs champs élémentaires ou segments fig. 1.12.

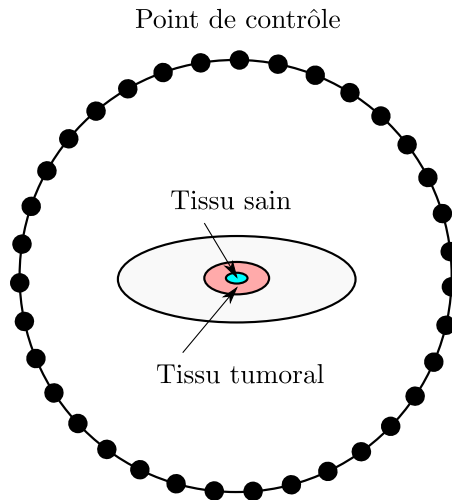


FIGURE 1.12: Discrétisation de la trajectoire du bras d'irradiation en plusieurs points de contrôle uniformément espacés.

Une variante de cette technique a été introduite en 2008 sous l'appellation arc-thérapie volumétrique par modulation d'intensité Otto (2008). La vitesse de rotation du bras de l'accélérateur et le débit de dose du faisceau sont des nouveaux paramètres incorporés dans la fonction objectif, utilisée par les algorithmes d'optimisations déjà élaborés pour la RCMi, améliorés et adaptés pour l'IMAT.

1.6 Plateau technique utilisé en radiothérapie externe

Nous présentons dans cette partie l'instrumentation de base nécessaire dans un service de radiothérapie.

1.6.1 Accélérateur linéaire (linac) médical

L'accélérateur linéaire médical est devenu un élément indispensable représentant la source de rayonnement la plus utilisée pour la thérapie des cancers. Cette machine a remplacé les sources radioactives du ^{60}Co , montrant plusieurs limitations liées principalement à l'énergie des photons émis ainsi qu'à la décroissance radioactive réduisant l'intensité du faisceau en fonction du temps. Un linac peut irradier en mode photons et en mode électrons, l'énergie des particules commence de 4 MeV généralement utilisée pour les localisations superficielles et peut atteindre les 25 MeV pour traiter en profondeur Podgorsak (2003). Le traitement avec une technique avancée utilisant la modulation d'intensité se fait avec des faisceaux de photons de 6 MeV.

Les techniques d'accélération de particules sont communes entre les différentes configurations commercialisées, cependant la composition et la géométrie des différents éléments font toujours l'objet d'une amélioration continue, visant à perfectionner le contrôle des propriétés dosimétriques du faisceau de particules.

La mise en place de programmes d'entretien préventif et d'assurance de qualité sont nécessaires pour assurer le bon fonctionnement et contrôler la stabilité des indicateurs physiques mesurables pouvant influencer l'homogénéité, la symétrie du profil de dose dans l'eau ainsi que la constance du débit d'irradiation.

1.6.2 Imageur portal

Le module d'imagerie portale, *Electronic Portal Imaging Device* (EPID) est un système embarqué dans le bras de l'accélérateur. Ce dispositif permet de faire des radiographies, utilisant le faisceau de l'accélérateur et de générer par la suite des images numériques radiographiques 2D permettant principalement le contrôle du bon positionnement du patient avant l'irradiation. L'image numérique acquise par l'imageur est comparée avec une image de référence calculée par le SPT, des logiciels fournis avec le système d'acquisition permettent de faire des opérations d'analyse et de recalage d'images.

L'imageur portal est aussi utilisé pour le contrôle de la précision du positionnement des lames et l'invariance de l'axe de rotation du collimateur multi-lames.

L'une des applications les plus étudiées, consiste à évaluer la possibilité de calculer la dose déposée à travers la mesure de la transmission [Van Elmpt et al. \(2008\)](#).

Un système d'imagerie portale embarqué sur un linac, utilisent l'une des trois technologies principales [Badel \(2009\)](#) :

- Le système caméra-miroir,
- Le système à matrice de chambre d'ionisation liquide ou
- Le système à matrice de détecteurs au silicium amorphe (*aSi*).

1.6.3 Instrumentation de mesures

L'étalonnage du faisceau de l'accélérateur linéaire se fait par la mesure du débit de dose et la détermination de la dose absorbée dans les conditions de référence [TRS \(2000\)](#). Ces mesures sont effectuées dans l'eau avec des dosimètres chimiques, des chambres d'ionisation ou des calorimètres. L'eau a été choisie par l'AIEA comme milieu de mesure de référence puisque sa densité électronique est comparable à celle d'un tissu biologique. L'étalonnage du faisceau de particules généré par un *linac* est effectué avec un ensemble d'équipements de mesure indispensables :

- Une **cuve d'eau**, motorisée et équipée d'un système de balayage selon les trois axes, qui servira de support mobile transportant le détecteur utilisé pour prendre une série de mesures (rendement en profondeur ou profile) successives et équidistantes.

- Une **chambre d'ionisation**, c'est le type de détecteur le plus utilisé pour l'étalonnage et durant les contrôles quotidiens de constance du débit de dose. Le volume et la forme de la chambre d'ionisation dépendra de la taille du champ d'irradiation, du type de particules du faisceau de rayonnement et de leurs énergies.
- Un **thermomètre** et un **baromètre**, les mesures de température et de pression, permettront de calculer le facteur correctif de la chambre d'ionisation pour des conditions atmosphériques différentes de celles mentionnées sur le certificat d'étalonnage de la chambre d'ionisation.
- Un **électromètre**, c'est un instrument très sensible aux faibles charges collectées par un détecteur dans un milieu de mesure. Certains appareils nécessitent un étalonnage en connectant le détecteur. La conversion de la charge mesurée en dose absorbée se fait suivant le protocole de mesure de l'AIEA en fonction du facteur d'étalonnage de la chambre d'ionisation et des différents facteurs correctifs [TRS \(2000\)](#).

1.6.4 Scanner simulateur

La tomodensitométrie joue actuellement un rôle central dans la chaîne de traitement en radiothérapie, les coupes scanner du patient représentent un fantôme numérique utilisé pour faire la délinéation du volume traité et des organes à risque avoisinants, ainsi que pour faire le calcul et l'optimisation de la distribution de dose prescrite par le médecin spécialiste.

Les scanners utilisés en radiothérapie se caractérisent par un diamètre plus large qu'un scanner ordinaire, pour avoir suffisamment d'espace laissant passer les moyens de contention utilisés pour immobiliser le patient pendant le traitement.

La table du scanner en fibre de carbone est dotée des mêmes caractéristiques techniques que la table de l'accélérateur, ce qui facilitera la reproductibilité et le centrage du patient pendant les séances de radiothérapie.

1.6.5 Système de planification de traitement

D'après l'Association Américaine des Physiciens en Médecine ([AAPM](#)) le terme planification de traitement désigne l'ensemble des processus visant à déterminer le nombre de champs d'irradiation, l'orientation, le type, les caractéristiques des faisceaux utilisés pour délivrer une forte dose afin de contrôler ou bien détruire une tumeur maligne [Fraass et al. \(1998\)](#). Ces paramètres sont déterminés et calculés sur ordinateur à travers un programme dédié appelé système de planification de traitement.

Ce logiciel sophistiqué permet au médecin spécialiste de définir le volume traité et les organes à risque avoisinants sur des coupes scanner ; pour permettre au physicien par la suite de déterminer la direction, la forme, l'énergie nominale et le type du faisceau de particules ; calculer la distribution de dose, l'évaluer et l'optimiser en se basant sur des histogrammes dose-volume. Ces processus enchaînés cherchent

à aboutir à la distribution de dose qui correspond au mieux à la prescription du médecin radiothérapeute.

Durant plus de 30 ans de développement et d'amélioration, plusieurs méthodes et algorithmes de calcul de dose ont été implémentés dans l'objectif de déterminer la distribution de dose avec la plus grande précision durant un temps d'exécution cliniquement envisageable. Dans la section suivante nous présentons un bref aperçu historiques sur ces approches de calcul de dose, leurs points forts et leurs limitations.

1.7 Algorithme de calcul de dose

1.7.1 Aperçu sur l'évolution des méthodes de calcul

L'idée du calcul de la dose sur ordinateur remonte aux années 1950 [Tsien \(1955, 1958\)](#). Depuis cette époque, les modèles utilisés ont connu une évolution importante montrée à travers la publication de plusieurs méthodes de calcul. Les premiers algorithmes basés sur l'utilisation de différents facteurs correctifs font directement appel aux données mesurées dans des fantômes d'eau sous une surface plane et une incidence normale. Le principe consiste à multiplier la valeur de dose mesurée dans des conditions dites de références, par des coefficients correctifs lorsque la situation clinique s'éloigne des conditions de références [Andreo et al. \(2002\)](#) (irrégularité de surface, incidence oblique du faisceau, hétérogénéité du milieu irradié, manque de rayonnement rétrodiffusé, ...). La base de données de mesures expérimentales, représente les distributions de dose sous forme discrétisées (principalement les courbes de rendement en profondeur et de profile de dose) de différentes tailles de champs d'irradiation. Ces mesures expérimentales peuvent être analysées pour établir des modèles mathématiques ajustés.

Cette approche n'est plus utilisée de nos jours pour faire le calcul de la distribution de dose. En revanche, elle conserve tout son intérêt comme outil de double calcul vérificatif du nombre d'unités moniteur, utilisée dans le cadre des processus de contrôle de qualité du plan de traitement [Calandrino et al. \(1997\)](#).

Pendant les années 1990, l'élaboration de la radiothérapie 3D conformationnelle a représenté un saut qualitatif en termes de planification de traitement assistée par ordinateur. L'invention de la tomodesitométrie [Hounsfield \(1973, 1980\)](#) qui consiste à mesurer l'absorption des photons X par les tissus, a permis une meilleure définition du volume cible et des organes à risques, en comparaison à la méthode manuelle antérieure faisant la délinéation à base de projections 2D acquises suite à une radiographie standard. Le calcul de la dose se fait également par le biais des images scanner représentant un fantôme virtuel du patient en trois dimensions, discrétisé en petits éléments de masse volumique $\rho_{(i,j,k)}$. Parmi les algorithmes les plus efficaces développés pour le calcul de la dose dans un fantôme voxelisé, nous citons la méthode de *superposition/convolution* adoptée et améliorée dans plusieurs travaux [Mackie et al. \(1985\)](#), [Liu et al. \(1997\)](#), [Ulmer et al. \(2005\)](#).

La tendance actuelle est focalisée sur l'adaptation des méthodes aléatoires de transport de particules, assurant une très grande précision sur le calcul de l'énergie dé-

posée [Mohan et al. \(1985\)](#), [Sempau et al. \(2001\)](#). L'obstacle majeur empêchant leur intégration dans la planification de traitement, est le temps d'exécution demandé extrêmement important. Cependant, la recherche de nouvelles solutions optimisant une lourde simulation représente toujours un champ scientifique en développement continu.

1.7.2 Composantes du faisceau

Les photons composant le faisceau généré par une machine de traitement, subissent une cascade d'interactions se produisant dans les différentes composantes de la tête d'irradiation. Ces interactions génèrent le rayonnement diffusé contribuant également à la dose déposée dans la zone irradiée du patient. L'algorithme de calcul de dose devrait correctement modéliser chacune des composantes du faisceau contribuant à la dose.

1.7.2.1 Photons primaires

Cette composante représente principalement les photons de freinage issus de la cible à l'intérieur de la tête d'irradiation. Pour les modèles basés sur la mesure, la contribution des photons primaires dans la dose au point de mesure est déduite à partir du RTA pour différentes tailles de champ [Mayles et al. \(2007\)](#). Ce type de grandeur est difficilement accessible par mesure expérimentale particulièrement pour les champs d'irradiation de très petite taille. L'estimation de la contribution des photons issus de la cible ou bien diffusés après interaction ainsi que les électrons de contamination, est généralement effectuée par des simulations Monte Carlo.

1.7.2.2 Photons diffusés dans la tête d'irradiation

Cette composante du faisceau est générée par toute interaction subie par les photons primaires dans la tête d'irradiation. Ces interactions vont principalement avoir lieu dans le cône égalisateur [fig.1.3](#), le système de collimation ou tout dispositif modificateur du faisceau. Le modèle le plus utilisé décrit cette composante de la fluence par une fonction *Gaussienne*. Les paramètres de la fonction d'ajustement dépendront essentiellement de la géométrie du cône égalisateur.

1.7.2.3 Contamination électronique

Cette composante du faisceau a été très souvent négligée dans les algorithmes de calcul. Sa contribution à la dose dans la région du *build-up* peut être négligée. En fonction de l'énergie du faisceau, la zone d'influence peut aller bien au-delà de la profondeur du maximum de dose z_{max} . Les électrons de contamination peuvent être classifiés en deux catégories. Les électrons issus des interactions dans la tête d'irradiation (prédominants à haute énergie) et les électrons générés par interaction dans

l'air (à basse énergie). Une fonction *Gaussienne* permettra de décrire la variation latérale, une atténuation exponentielle approximera la diminution de la contamination en fonction de la profondeur.

1.7.2.4 Pénombre, transmission et fuites du collimateur

La contribution des régions caractérisées par une faible fluence de particules, devient significative en cas d'utilisation des techniques de modulation d'intensité (RCMI). La prise en compte des effets de transmission et fuite des lames du collimateur est donc d'une importance majeure.

1.7.2.5 Rayonnement diffusé dans le corps du patient

Deux types d'approches existent pour représenter la contribution du rayonnement diffusé dans le patient à la dose déposée dans le volume cible. La première a été développée par *Clarkson Clarkson (1941)* appelée aussi méthode de séparation rayonnement diffusé-primaire. Le champ d'irradiation est décomposé en n secteurs circulaires de rayon r_i et d'angle $\Delta\theta_i$, centrés sur le même point. La contribution du rayonnement diffusé est la somme des contributions de chaque secteur élémentaire. La deuxième approche est basée sur l'utilisation des méthodes de calcul Monte Carlo de manière directe ou indirecte :

- Méthode directe : transport de particules par la méthode de Monte Carlo.
- Méthode indirecte : convolution superposition du point *kernel*, le milieu est décomposé en éléments de volume source de rayonnement diffusé, la contribution de chaque élément par unité de fluence est pré-calculée à travers des simulations Monte Carlo, la détermination de la fluence en chaque point du milieu permettra ensuite de déduire la proportion du rayonnement diffusé contribuant à la dose.

1.7.3 Méthode du faisceau large (empirique)

1.7.3.1 Représentation tabulée des données du faisceau

De nombreux algorithmes de calcul de dose étaient fondés sur ce principe *Thwaites (1990)*. Par souci de simplicité, seul le plus souvent mis en œuvre est décrit dans la présente partie. Dans les années 1970 *Milan* et *Bentley* ont développé un logiciel dédié pour la planification du traitement en radiothérapie précurseur des SPT modernes *Milan & Bentley (1974)*. La nécessité d'un système rapide et précis a influencé le modèle qu'ils ont développé. Les données expérimentales du faisceau sont stockées sous forme de tableaux de rendement en profondeur sur l'axe et à distance de l'axe central.

Les courbes de rendement en profondeur dépendent de la taille du champ d'irradiation et puisqu'il est pratiquement impossible d'enregistrer ces données pour toutes les configurations, seuls les champs carrés ont été considérés. Chaque courbe a été

de mesures ne dépassant pas sept points. Chacun des paramètres utilisés dans le processus d'ajustement a été lié aux propriétés physiques du faisceau.

1.7.4 Corrections associées à l'inhomogénéité et à la variation du contour du patient

La méthode du faisceau large calcule la distribution de dose dans un milieu homogène en se basant principalement sur des mesures expérimentales. Les courbes de profil de dose et de rendement en profondeur utilisées sont mesurées dans les conditions de référence [Andreo et al. \(2000\)](#). Pour calculer la dose dans les conditions cliniques, il faut prendre en considération plusieurs facteurs correctifs. En réalité, le corps du patient est constitué de tissus de différentes densités, d'où la nécessité d'établir un facteur correctif permettant de corriger la valeur de dose initialement estimée dans un milieu homogène. Un deuxième facteur important concerne l'effet de l'obliquité de la surface du patient entraînant une variation de la distance entre la source d'irradiation et le contour externe du patient [fig.1.14](#).

1.7.4.1 Effet du contour du patient

L'une des méthodes de correction du contour patient dans les régions proches de l'axe central du faisceau se base sur la notion de distance effective source-peau (DSP). C'est une correction qui dérive de la loi de l'inverse carrée de la distance appliquée aux valeurs de rendement en profondeur mesurées, lorsqu'un changement de la DSP est effectué. L'augmentation de la DSP en un point particulier P' hors axe est h [fig.1.14](#), le point correspondant sur l'axe à la même profondeur d est P , alors la dose au point P' est égale à la dose au point P multipliée par le facteur de correction C_1 , défini par :

$$C_1 = \left(\frac{DSP + d}{DSP + d + h} \right)^2 \quad (1.25)$$

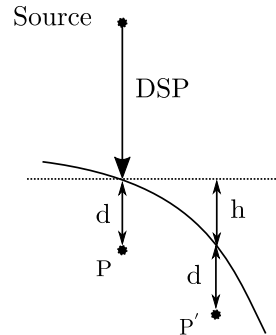


FIGURE 1.14: Effet de l'obliquité sur la dose au point P' situé à la même profondeur d que le point P . Le point P' est supposé proche de l'axe du faisceau, sous une même profondeur d , le facteur d'atténuation reste inchangé.

Le point P sur l'axe du faisceau et le point de calcul P' sont situés à différentes distances source-point de calcul, la dose au point P' est obtenue de celle au point P corrigée par la loi de l'inverse carré, la distance source point de calcul a changé de d à $d + h$. Le nouveau point de calcul P' se situe toujours à la même profondeur que le point P .

1.7.4.2 Effet des hétérogénéités dans le corps du patient

La correction de l'effet de l'hétérogénéité du corps du patient sur la dose calculée à partir de données mesurées dans un milieu homogène, fait intervenir la notion de profondeur effective calculée par la sommation suivante :

$$d_{eff} = \frac{1}{\rho_{eau}} \cdot \sum_{i=1}^n t_i \cdot \rho_i \quad (1.26)$$

ρ_i est la masse volumique du tissu i , d'épaisseur t_i .

Cette approche propose de calculer à partir de la profondeur d du point de calcul P situé sous plusieurs structures superposées de différentes densités, une profondeur effective d_{eff} équivalent eau, permettant d'atténuer la même fraction de photons que la profondeur réelle. Cette correction est unidimensionnelle et ignore toute variation de rayonnement diffusé. La dose en un point dans un milieu hétérogène est obtenue de celle mesurée dans un fantôme d'eau multipliée par le facteur C_2 eq.1.27, qui tient compte à la fois de la différence des conditions de diffusion (rapport des rendements en profondeur) et de la différence entre les profondeurs réelle et effective. Ce facteur s'écrit sous la forme :

$$C_2 = \frac{R(d_{eff})}{R(d)} \cdot \left(\frac{DSP + d_{eff}}{DSP + d} \right)^2 \quad (1.27)$$

$R(d_{eff})$, $R(d)$ sont respectivement les rendements en profondeur à la profondeur effective d_{eff} et à la profondeur réelle d .

D'autres facteurs correctifs tiennent compte de la dimension de l'hétérogénéité et de sa position, nous citons le facteur de *Batho* (1964) qui s'écrit en fonction du rapport tissu-air RTA et de la masse volumique ρ [Siddon \(1984\)](#). Pour un point situé en dessous de deux structures respectivement de masse volumique ρ_1 et ρ_2 fig.1.15, le facteur correctif est :

$$C_3 = \frac{RTA(l_2, A_d)^{(\rho_2 - \rho_1)}}{RTA(l_1, A_d)^{(1 - \rho_1)}} \quad (1.28)$$

l_1 distance entre le point de calcul P et la frontière supérieure de l'hétérogénéité.

l_2 distance entre le point de calcul P et la frontière inférieure de l'hétérogénéité.

A_d dimension du champ d'irradiation.

Pour analyser l'évolution du facteur correctif C_3 eq.1.28 en fonction des masses volumiques ρ_1 et ρ_2 , nous considérons que les distances l_1 et l_2 sont supérieures à la profondeur suffisante pour établir l'équilibre électronique. Nous allons supposer que $\rho_2 < \rho_1$ et $\rho_1 > 1$, dans cette situation le facteur correctif sera supérieur à l'unité, ce qui signifie qu'il y aura une surestimation de la dose au point de calcul en

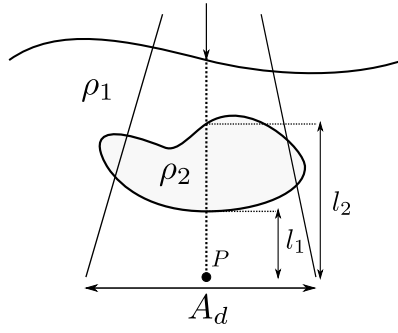


FIGURE 1.15: Correction de l'effet de l'hétérogénéité sur la dose au point P , par la méthode de *Batho* pour un champ d'irradiation de taille A_d . Le point P se situe dans un milieu de masse volumique ρ_1 et au-dessous d'une structure de masse volumique ρ_2 .

dessous de la structure de densité ρ_2 . Cette correction est tout à fait logique puisque l'atténuation des photons sera faible dans la structure de masse volumique ρ_2 , donc le faisceau passant par cette structure sera plus pénétrant.

Une forme généralisée du facteur correctif de *Batho* est donnée par l'expression de l'eq.1.29, en présence d'un nombre n de structures de différentes densités. Cette formulation utilise la notion du rapport tissu fantôme (RTF) [Sontag & Cunningham \(1977\)](#), [Cassell et al. \(1981\)](#) :

$$C_4 = \prod_{i=1}^n RTF(l_i, A_d)^{(\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (1.29)$$

1.7.5 Méthode de superposition

Cette approche considère que la dose en un point $P(x, y, z)$ représente la somme des contributions de toutes les particules mises en mouvement dans des éléments de volume $dV(x', y', z')$ situés à différentes distances de P fig.1.16. L'énergie élémentaire déposée au point P , résulte d'une fluence énergétique $\Phi_p(x', y', z')$ des photons primaires faisant des interactions dans l'élément de volume dV dans lequel les particules chargées seront créées et mises en mouvement vers le point P . $\Phi_s(x, x', y, y', z, z')$ représente l'énergie diffusée par les photons primaires dans l'élément de volume dV et contribuant à la dose au point P .

La dose totale au point P est donc la somme des contributions de toutes les particules secondaires créées à distance mais qui ont déposé totalement ou partiellement leurs énergie au point P . Cette formulation est exprimée par le produit de convolution suivant :

$$D_P = \iiint \Phi_p(x', y', z') \cdot \Phi_s(x, x', y, y', z, z') dV \quad (1.30)$$

Les bornes de l'intégrale sur le volume sont définies par les limites géométriques de l'objet irradié. C'est une forme complexe d'intégrale triple nécessitant un calcul numérique. L'une des méthodes d'optimisation du temps d'exécution consiste à la transformer en intégrale double ou simple. Cette simplification se base sur différentes hypothèses et approximations utilisées dans les algorithmes implémentés dans les systèmes de planification de traitement.

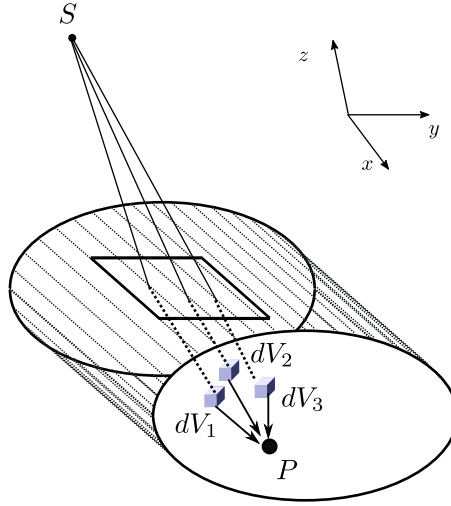


FIGURE 1.16: Représentation de la dose au point P calculée par la méthode de superposition.
La dose au point P est la somme de l'énergie déposée par les particules chargées mises en mouvement suite aux interactions des photons primaires ou diffusés dans un élément de volume distant du point P .

Le dépôt de dose par un faisceau de photons au point P résulte des contributions des photons et des électrons, créés suite à des interactions qui ont eu lieu dans les éléments de volume dV à distance de P . Le dépôt ou le transfert d'énergie pour chaque composante est influencé par le pouvoir de pénétration qui diffère en fonction de la nature de la particule et de son énergie.

1.7.6 Approche *pencil-beam*

Cette méthode a été développée au début pour les faisceaux d'électrons, la première tentative pour l'adapter aux photons a été proposée par *Schoknecht* (1971) [Schoknecht \(1971\)](#). La convolution du *pencil-beam* est une intégration 2D sur l'intervalle défini par les limites du champ d'irradiation. Cette méthode tient compte des variations de l'intensité du faisceau incident dues à l'atténuation par le collimateur secondaire, ou à l'effet de la divergence du faisceau aux bords du champ d'irradiation. Cette méthode qui dérive de la superposition utilise des données pré-calculées appelées *kernel* de convolution, représentant la distribution de l'énergie cédée par le *pencil-beam* normalisée à l'unité de fluence au point de pénétration à la surface du patient.

En général l'expression de la dose calculée par l'approche *pencil-beam* est donnée par la convolution 2D suivante :

$$D(x, y, z) = \frac{\mu}{\rho} (\Psi_E * K_{PB}) = \iint \frac{\mu}{\rho} \cdot \Psi_E(x', y') \cdot K_{PB}(x - x', y - y', z) \cdot dx' \cdot dy' \quad (1.31)$$

$\Psi_E(x', y')$ fluence énergétique au point $P'(x', y')$.

$\frac{\mu}{\rho} \Psi_E(x', y')$ énergie totale par unité de masse déposée au point P en provenance de P' (électrons secondaires et photons diffusés) connue sous le nom de *Total Energy Released Per Mass Unit* [TERMA](#) [Gy].

$\frac{\mu}{\rho}$ le coefficient d'atténuation massique [$\text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$].

$K_{PB}(x - x', y - y', z)$ est la valeur du *kernel* à la position (x', y', z) , pour un faisceau étroit (*pencil beam*) pénétrant à l'intérieur du patient par le point $P'(x', y', z_0)$ situé à la surface ($z = z_0$). Cette quantité représente la fraction d'énergie cédée par unité de masse en un point P due à la fluence énergétique des particules primaires entrants par le point P' situé à la surface.

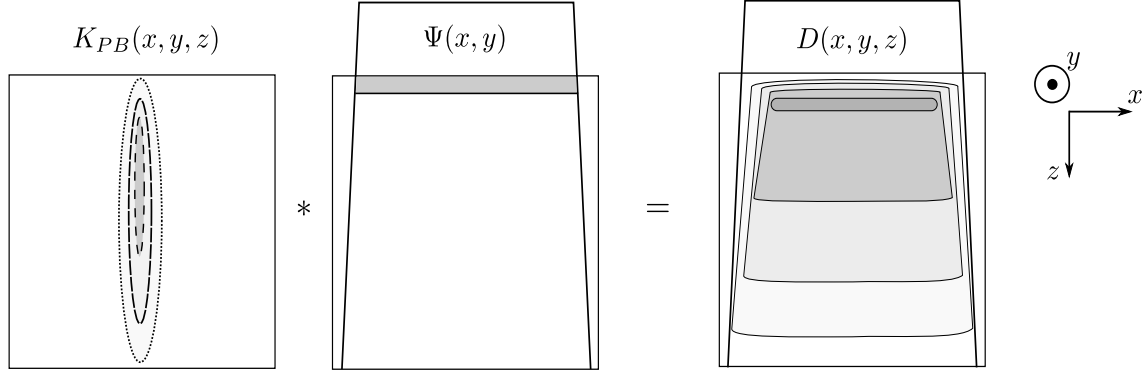


FIGURE 1.17: Représentation d'une distribution de dose tridimensionnelle dans un fantôme d'eau calculée par la méthode *Pencil Beam*. La dose $D(x, y, z)$ en tout point du fantôme, est donnée par le produit de convolution du *kernel* K_{PB} et de la fluence énergétique des photons à la surface du fantôme $\Psi(x, y)$.

Le faisceau d'irradiation est subdivisé en faisceaux élémentaires "*pencil-beam*" à chaque faisceau étroit correspond le *kernel* K_{PB} qui représente la distribution de dose en profondeur. La dose totale est donc la somme des contributions de chaque *kernel* élémentaire fig.1.17. Le temps de calcul de cette sommation peut être optimisé en utilisant la transformée de Fourier rapide (FFT) [Welch \(1967\)](#).

1.7.6.1 Détermination de la fluence énergétique primaire

En l'absence de modificateurs de faisceau, la fluence est uniforme sur toute la surface ouverte du champ, le flux de particules est une fonction de la transmission à travers le collimateur. La méthode de calcul est généralement basée sur une considération géométrique complétée par des mesures de transmission à travers le collimateur, ou un produit de convolution avec une fonction représentant la distribution spatiale de la source de photons primaires [Mohan & Chui \(1987\)](#).

L'influence du filtre égalisateur est modélisée par une fonction radiale dérivée des mesures de profils de dose sur la diagonale du champ à une profondeur supérieure à la portée des électrons de contamination. La dose du rayonnement diffusé du collimateur secondaire peut être calculée de la même manière. En cas d'utilisation de modificateur de faisceau (filtre en coin, compensateur, ...), l'atténuation du faisceau primaire génère des photons diffusés.

1.7.6.2 Détermination du *kernel* du *pencil beam*

Plusieurs méthodes ont été implémentées pour déterminer la distribution du *kernel* [Mohan & Chui \(1987\)](#) l'ont directement déterminé avec la méthode de Monte Carlo

pour des faisceaux de différentes énergies. En pratique un *kernel* poly-énergétique est calculé par une simple addition de *kernels* élémentaires mono-énergétiques, chacun est pondéré en fonction de la contribution du spectre de rayons X correspondant. Cette méthode nécessite la connaissance du spectre en énergie des photons émis par l'accélérateur (idéalement en tout point de la surface d'entrée du fantôme). La simulation Monte Carlo reste un outil fiable déterminant avec grande précision la distribution du *kernel*, à condition de modéliser fidèlement les propriétés du faisceau en question.

1.7.7 Méthode de convolution superposition du point *kernel*

La méthode de convolution superposition (*Convolution/Superposition*) a été discutée par plusieurs groupes durant les années 1980 Ahnesjö (1984), Chui et al. (1984), Boyer & Mok (1985). Cette approche a précédé celle du *pencil beam* utilisée pour les photons. La convolution superposition offre un bon compromis entre la simplicité et la précision de calcul.

Le même formalisme de base expliquée pour la méthode de convolution est toujours adopté pour la *Convolution/Superposition*, la dose en un point P est égale à la somme des contributions de toutes les particules mises en mouvement à partir du point P' . Le *kernel* utilisé dans le calcul, représente la distribution de dose autour d'une source ponctuelle située dans un milieu homogène.

$$D(x, y, z) = \frac{\mu}{\rho} \cdot (\Psi * K)(x, y, z) = \iiint \frac{\mu}{\rho} \cdot \Psi(x', y', z') \cdot K(x - x', y - y', z - z') dV' \quad (1.32)$$

$\Psi(x', y', z')$ fluence énergétique au point P' .

$dV' = dx' \cdot dy' \cdot dz'$ élément de volume élémentaire (voxel).

$\frac{\mu}{\rho} \cdot \Psi(x', y', z')$ énergie total par unité de masse, transportée par les particules quittant l'élément de volume dV (TERMA).

$K(x - x', y - y', z - z')$ fraction d'énergie déposée au point de calcul P .

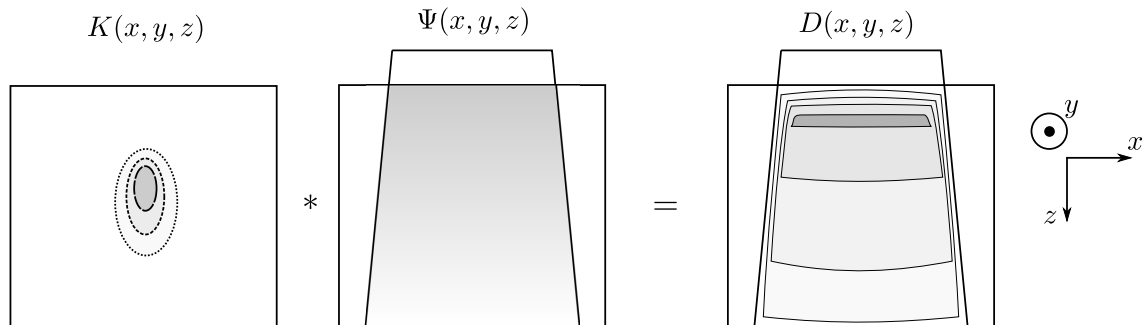


FIGURE 1.18: Représentation d'une distribution de dose tridimensionnelle dans un fantôme d'eau calculée par la méthode *Convolution/Superposition*. La dose $D(x, y, z)$ en tout point du fantôme, est donnée par le produit de convolution du *kernel* ponctuel K et de la fluence énergétique tridimensionnelle des photons dans le fantôme $\Psi(x, y, z)$.

La dose totale est égale à la somme des contributions de tous les éléments de volume entourant le point de calcul. La convolution du *kernel* ponctuel avec la fluence énergétique atténuée tridimensionnelle, permettra d'estimer l'énergie totale déposée par les particules mises en mouvement dans les éléments de volume entourant le point de calcul fig.1.18. Cette méthode tient compte du rayonnement diffusé issu de chaque élément de volume. Le calcul de la dose nécessite la connaissance de la fluence énergétique ainsi que la fraction d'énergie déposée.

1.7.7.1 Détermination de la fluence énergétique

La fluence énergétique tridimensionnelle est déduite à partir de la fluence énergétique bidimensionnelle à la surface du patient, suivant la même démarche décrite dans la section de la convolution *pencil-beam*. La fluence en tout point dans le volume de calcul est déterminée en fonction de la fluence à la surface multipliée par un facteur correctif de l'effet de l'atténuation en fonction de la densité Zefkili et al. (1994), Lee (1997). TERMA est obtenue en tout point par le produit de la fluence énergétique et du coefficient d'interaction massique correspondant qui dépend à la fois de l'énergie, de la composition et la densité du milieu traversé.

1.7.7.2 Détermination de la distribution du point *kernel*

La simulation Monte Carlo est la méthode standard pour déterminer la distribution du *kernel* pour un faisceau mono-énergétique dans l'eau. Un fantôme subdivisé en voxels élémentaires permettra de calculer la répartition du dépôt d'énergie autour d'un point central. La géométrie sphérique est souvent utilisée puisqu'elle est mieux adaptée à la nature du problème.

Pour accélérer le calcul et minimiser le temps d'exécution une séparation entre le *kernel* primaire et diffusé est effectuée, eq.1.33 et eq.1.34. Plusieurs methode de normalisation du *kernel* K ont été proposées. L'approche commune consiste à normaliser la distribution de K sur l'énergie radiante Ahnesjö & Aspradakis (1999).

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} K(x, y, z).dV \equiv 1 \quad (1.33)$$

d'après Mackie et al. et Boyer Mackie et al. (1988) :

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} K_p(x, y, z).dV = \frac{\mu_{en}}{\mu} \quad \iiint K_s(x, y, z) = \frac{\mu - \mu_{en}}{\mu} \quad (1.34)$$

K_p et K_s sont respectivement les *kernels* du rayonnement primaire et diffusé.

μ_{en} coefficient linéique d'absorption en énergie.

μ coefficient d'interaction des photons avec la matière par les trois effets prédominants, photoélectrique, Compton et matérialisation.

Un *kernel* poly-énergétique est souvent calculé en fonctions de plusieurs *kernels* mono-énergétiques pondérés.

1.8 Conclusion

L'utilisation des rayonnements ionisants pour la thérapie et pour le diagnostic a succédé la découverte révolutionnaire de la radioactivité naturelle. La connaissance et l'étude détaillée des interactions rayonnement-matière ont divulgué la nécessité de la caractérisation de toute source de rayonnement utilisée pour des fins thérapeutiques.

La physique médicale et particulièrement la radiothérapie externe ont bénéficié du saut qualitatif en matière de conception et d'adaptation des accélérateurs linéaires de particules initialement développés pour des objectifs de recherche fondamentale. Ce type de dispositifs donne la possibilité de contrôler l'énergie et la fluence des particules accélérées.

La détermination de la région à traiter se faisait au début par projection du champs d'irradiation sur des images de radiographie standard. Ce processus entraîne une modeste efficacité de traitement principalement à cause des incertitudes élevées sur le positionnement du patient, la détermination du volume cible et des organes à risque avoisinants.

L'invention des systèmes de planification de traitement permettant de calculer la distribution de dose et l'introduction de la tomodesitométrie ont marqué l'ère de la radiothérapie conformationnelle 3D. Cette technique permet de bien définir les limites du volume cible et les paramètres de l'accélérateur assurant la meilleure distribution de dose épargnant les tissus sains avoisinants.

La radiothérapie conformationnelle 3D trouve ses limites lorsque la géométrie du volume cible est de forme concave, une technique plus innovante se basant sur la modulation de la fluence de particules a montré une très bonne performance pour ce genre de problème. La radiothérapie par modulation d'intensité utilise le collimateur multilames pour convertir les profiles de dose homogènes en profiles modulés. Lorsque cette modulation est accompagnée d'une rotation continue du bras d'accélérateur, nous parlons d'acr-thérapie par modulation d'intensité.

Le calcul de la distribution de dose sur ordinateur est d'une importance majeure pour toutes les techniques d'irradiation. Les méthodes analytiques et hybrides développées, durant plusieurs années, avaient pour objectif d'équilibrer la précision obtenue avec le temps d'exécution. Cependant, la méthode Monte Carlo restera la meilleure en termes de justesse. Dans le prochain chapitre, nous allons présenter des concepts de base sur la simulation Monte Carlo et nous allons enchaîner par l'application de cette méthode dans la modélisation et simulation des faisceaux de particules produits par les accélérateurs linéaires médicaux.

Chapitre 2

Introduction à la simulation numérique par la méthode de Monte Carlo, application en radiothérapie externe

2.1 Introduction

Les méthodes de Monte Carlo ([MC](#)) proposent une solution numérique à un problème complexe qui décrit l'évolution continue d'un système. La solution se base sur l'utilisation des générateurs de nombres aléatoires et des techniques d'échantillonnage à partir de densités de probabilité [Seco & Verhaegen \(2013\)](#).

Généralement, cette approche est utilisée pour simuler les phénomènes à caractère aléatoire. Dans ce qui suit, nous présentons les bases fondamentales de la méthode de Monte Carlo et nous allons discuter ses applications en particulier la simulation des faisceaux de photons pour le calcul de la distribution de dose en radiothérapie externe.

2.2 Principe des méthodes de Monte Carlo

2.2.1 Aperçu historique

L'utilisation de l'approche Monte Carlo a été proposée par *Ulam* durant les années 1940 pour la première fois dans le cadre du programme de recherche secret visant la fabrication de la première bombe atomique [Eckhardt \(1987\)](#). Une collaboration entre trois experts *Ulam*, *Von Neuman* et *Metropolis* connus par leurs compétences en mathématique fondamentale, informatique et physique théorique, ainsi que l'apparition du premier ordinateur sont des circonstances qui ont facilité l'apparition de l'implémentation développée à l'époque pour modéliser le problème de diffusion des

neutrons dans un matériau fissile. Ils ont également publié plusieurs travaux montrant la possibilité d'adapter les méthodes d'échantillonnage statistique pour traiter des problèmes à caractère déterministe [Metropolis & Ulam \(1949\)](#).

Cette méthode a été pour la première fois abordée en physique médicale durant les années 1960. [Raeside](#) dans un article résume les fondements scientifiques de base de cette technique et souligne l'effet de la périodicité d'un générateur de nombres aléatoires sur la justesse d'un résultat basé sur ce générateur [Raeside \(1976\)](#). Il met également en évidence la relation entre le générateur de nombres aléatoires et les différentes techniques d'échantillonnage. L'auteur a aussi discuté l'importance des techniques de réduction de variance, visant à améliorer l'efficacité du calcul et la précision sur la grandeur d'intérêt sans simuler un nombre infini d'événements. L'ouvrage cite les premières applications de la méthode MC en physique médicale, portant sur le calcul de l'efficacité des détecteurs de rayonnement γ utilisés en médecine nucléaire [Ellett & Brownell \(1960\)](#), [Steyn et al. \(1973\)](#); la simulation du transport de particules chargées dans la matière [Berger \(1963\)](#).

En 2006 [Rogers](#), publie un article résumant 50 ans d'utilisation de la méthode de MC en physique médicale [Rogers \(2006\)](#). Dans ce papier, il discute l'évolution des codes basés sur cette approche stochastique largement explorée pendant cette période.

En radiothérapie, les méthodes de MC ont beaucoup servi à modéliser les systèmes complexes tels que la tête d'irradiation des accélérateurs linéaires à électrons ou les accélérateurs circulaires à protons ou à ions lourds [Rogers et al. \(1995\)](#), [Grevillot, Bertrand, Dessy, Freud & Sarrut \(2011\)](#). Ces modèles ont été implémentés pour remonter à certaines grandeurs inaccessibles par mesure expérimentale. Les applications de l'approche aléatoire ont touché les divers aspects d'utilisation du rayonnement ionisant.

2.2.2 Générateurs de nombres aléatoires

La simulation d'un processus par la méthode de MC se base principalement sur le tirage indépendant d'une série de nombres aléatoires. Cet ensemble de valeurs est généré par un programme informatique appelé *générateur de nombres aléatoires*. Cependant, le nombre généré par ce programme étant par définition prévisible, ne rendra jamais le tirage de nature purement aléatoire, d'où l'appellation *générateur de nombres pseudo-aléatoires*.

Une séquence de très grande taille est nécessaire pour résoudre un problème stochastique quelconque. Les nombres *pseudo-aléatoires* d'une même série, ne doivent pas montrer de corrélation ou de dépendance. Pour assurer cette propriété essentielle, un *pseudo-générateur de nombres aléatoires* devrait avoir une période d'échantillonnage suffisamment large, permettant d'éviter la corrélation des résultats au cas où la suite est réutilisée plusieurs fois durant la simulation. La suite de valeurs devrait être uniformément distribuée sur n dimensions.

La majorité des *pseudo-générateurs* génère une suite de valeurs uniformément distribuées sur l'intervalle $[0, 1]$. L'une des classes de ces *pseudo-générateurs* est appelée

linéaires congruentielle [Lehmer \(1951\)](#). Une séquence de nombres entiers $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3, \dots$, est générée dans l'intervalle $[0, m - 1]$ par la relation de récurrence suivante :

$$\zeta_{i+1} = (a\zeta_i + b) \bmod m \quad i \geq 0 \quad (2.1)$$

ζ_0 : une valeur d'initialisation.

a : un coefficient multiplicateur.

b : une constante.

$m = 2^k - 1$: nombre maximal pouvant être représenté sur un espace mémoire de k bits.

Une autre classe de *pseudo-générateurs* de nombres aléatoires appelée *subtract-with-borrow*, fait appel à la notion de la retenue ainsi qu'à des opérations arithmétiques de base telle que l'addition et la soustraction [Marsaglia & Zaman \(1991\)](#).

La fonction `RANMAR` développée par le [CERN](#) à titre d'exemple, a été utilisée pour générer les variables aléatoires dans le code `EGS4` et le code `XVMC` [Fippel et al. \(1999\)](#).

2.2.3 Intégration numérique

Le calcul numérique permet d'approximer la valeur d'une intégrale I eq.2.2 d'une fonction $f(x)$, définie sur un domaine $[a, b]$.

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (2.2)$$

L'intégration numérique est très efficace lorsqu'il s'agit d'une fonction complexe dont le calcul de primitive est analytiquement rigoureux. Plusieurs algorithmes ont été développés dans ce cadre, parmi lesquelles nous pouvons citer les méthodes de *trapèzes*, de *Simpson*, etc. La démarche la plus simple consiste à décomposer le domaine d'intégration en N intervalles de largeur constante, sur chacun l'aire d'un rectangle de largeur $(b - a)/N$ et de hauteur $f(x_i)$, x_i est le point centrale de l'intervalle i . Une estimation de l'intégrale I peut donc être écrite sous la forme :

$$I \approx \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (2.3)$$

Cette méthode peut converger rapidement lorsqu'il s'agit d'une intégrale unidimensionnelle. Pour une intégrale multiple à n variables, la décomposition en secteurs élémentaires se fera sur chaque dimension, le nombre total de secteurs sera donc égal à N^n , ce qui entraîne une lente convergence vers la solution estimée.

L'intégrale de la fonction $f(x)$ peut être exprimée par la valeur moyenne $\bar{f}$ eq.2.4 souvent appelée *estimation* ou *espérance mathématique* de la fonction évaluée à des points aléatoires sur l'intervalle $[a, b]$ [Caffisch \(1998\)](#).

$$I = \int_a^b f(x) dx = (b - a) \bar{f} \quad (2.4)$$

Soit x une variable aléatoire uniformément distribuée sur l'intervalle $[a, b]$, l'inté-

grale est donc égale à l'espérance mathématique de la fonction f sur le domaine d'intégration :

$$I = (b - a)\mathbb{E}[f(x)] \quad (2.5)$$

Pour une intégrale multiple à n dimensions $I^n = [a, b]^n$, l'eq.2.5 devient :

$$I = (b - a)^n \mathbb{E}[f(x)] = \int_{I^n} f(x) dx \quad (2.6)$$

x sera un vecteur uniformément distribué sur le domaine d'intégration I^n .

La formule de quadrature Monte Carlo sur une dimension se base sur une interprétation probabiliste d'une intégrale déterministe. Considérant une séquence de N valeurs x_i échantillonnées d'une distribution uniforme, une estimation de l'intégrale est écrite sous la forme :

$$I_N = \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (2.7)$$

D'après la loi des grands nombres [Feller \(1971\)](#), l'eq.2.7 converge vers la valeur réelle de l'intégrale avec une probabilité égale à 1, lorsque N le nombre de valeurs aléatoires échantillonnées est très grand :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} I_N = I \quad (2.8)$$

De manière générale l'expression de l'erreur sur le calcul de l'intégrale I par la méthode de Monte Carlo est écrite sous la forme :

$$\epsilon_N = I - I_N \quad (2.9)$$

L'écart quadratique moyen, *Root Mean Square Error* ([RMSE](#)) s'exprime en fonction de l'espérance mathématique de l'erreur $\mathbb{E}[\epsilon_N]$ par l'expression :

$$RMSE = \sqrt{\mathbb{E}[\epsilon_N^2]} \quad (2.10)$$

2.2.4 Précision de la méthode Monte Carlo

Le *théorème de la Limite Centrale* ([TLC](#)) [Feller \(1971\)](#), [Gnedenko \(2017\)](#) décrit l'ordre de grandeur et les propriétés statistiques de l'erreur sur l'intégration par la méthode de Monte Carlo.

Théorème 2.1 *Lorsque N , le nombre de valeurs aléatoires x_i échantillonnées pour estimer l'intégrale I , est très grand, l'erreur ϵ_N suit une loi normale :*

$$\epsilon_N \approx \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \nu \quad (2.11)$$

ν est une variable aléatoire décrite par la distribution gaussienne, σ est l'écart type de la fonction f .

$$\sigma = \sqrt{\text{var}(f(x_i))}, \quad \text{var}(f(x)) = \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] \quad (2.12)$$

l'expression de σ pour une fonction intégrée sur n dimensions est écrite sous la forme :

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{(b-a)^n} \int_{I^n} (f(x) - I)^2 dx}. \quad (2.13)$$

Une expression plus rigoureuse pour déterminer la probabilité que $a \leq \nu \leq b$ est donnée par la formule suivante :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \text{Prob} \left(a < \frac{\sqrt{N}}{\sigma} \epsilon_N < b \right) = \text{Prob}(a < \nu < b) \quad (2.14)$$

D'après le théorème précédant l'erreur sur l'intégrale de la fonction f par la méthode de MC tend vers $1/\sqrt{N}$, multipliée par l'écart type de la fonction f . La distribution statistique de l'erreur est approximativement une variable aléatoire qui suit la loi *normale*. Ce résultat ne définit pas exactement une valeur absolue de l'erreur, mais attribue une densité de probabilité ν , montrant la possibilité de remonter à partir d'un calcul d'intégrale déterministe à un résultat probabiliste.

2.2.5 Méthodes d'échantillonnage non-uniforme

Les générateurs de nombres *pseudo-aléatoires* génèrent des séquences de valeurs uniformément distribuées. Une variable de loi de probabilité *non-uniforme* ne peut être échantillonnée qu'à travers une transformation appliquée à une variable de densité de probabilité uniforme.

Dans ce qui suit nous abordons deux parmi les méthodes les plus utilisées pour générer deux exemples de variables aléatoires à densité de probabilité non-uniforme.

2.2.5.1 Méthode de transformation

C'est une méthode générale permettant de générer une variable aléatoire x ayant une densité de probabilité $p(x)$, à travers la transformation d'une variable aléatoire uniforme y . L'objectif est de trouver une fonction inverse $X(y) = x$, x la valeur obtenue après cette transformation. La variable obtenue par la transformation $X(y)$ devrait avoir la densité de probabilité $p(x)$.

La fonction de répartition ou la densité de probabilité cumulée est définie par :

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx' \quad (2.15)$$

La détermination de la fonction $X(y)$ se fait par le calcul de l'espérance mathématique, pour toute fonction f :

$$\mathbb{E}_p[f(x)] = \mathbb{E}_{\text{unif}}[f(X(y))] \quad (2.16)$$

Un changement de variable donne :

$$\begin{aligned}\int f(x)p(x)dx &= \int f(X(y))dy \\ &= \int f(x)\frac{dy}{dx}dx\end{aligned}\tag{2.17}$$

ce qui implique $p(x) = dy/dx = 1/X'(y)$, donc $\int^{X(y)} p(x)dx = y$

$$\begin{aligned}P(X(y)) &= y \\ X(y) &= P^{-1}(y)\end{aligned}\tag{2.18}$$

Cette formulation semble difficile à implémenter surtout lorsque le calcul de la fonction inverse P^{-1} est analytiquement compliqué.

Nous allons illustrer la méthode par l'exemple typique d'échantillonnage d'une variable aléatoire suivant la loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$.

La densité de probabilité p et la distribution cumulée P de la loi normale sont données par :

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right)\tag{2.19}$$

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(\frac{-t^2}{2}\right) dt\tag{2.20}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\tag{2.21}$$

$\operatorname{erf}(x)$ est la *fonction d'erreur* définie par :

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt\tag{2.22}$$

Pour échantillonner une variable suivant la loi *gaussienne* eq.2.19, il faut calculer la fonction inverse de la distribution cumulée de la fonction *gaussienne* eq.2.21. Cette transformation permettra de générer une variable x de densité de probabilité normale à partir d'une variable y de loi uniforme eq.2.24.

$$y = P(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\tag{2.23}$$

donc,

$$x = \sqrt{2} \operatorname{erf}^{-1}(2y - 1)\tag{2.24}$$

Une approximation de la fonction inverse $\operatorname{erf}^{-1}(x)$ a été développée [Kennedy Jr & James \(1980\)](#). Une méthode autre que la transformation, appelée méthode de *Box-Muller* [Golder & Settle \(1976\)](#) peut également être utilisée. Cette approche ne nécessite pas l'inversion de la fonction d'erreur eq.2.21. À partir de deux variables y_1, y_2 uniformément distribuées sur l'intervalle $]0, 1]$, deux variables x_1 et x_2 qui

suivent la distribution normale sont obtenues par :

$$\begin{aligned}x_1 &= \sqrt{-2 \log_2(y_1)} \cos(2\pi y_2), \\x_2 &= \sqrt{-2 \log_2(y_1)} \sin(2\pi y_2)\end{aligned}\tag{2.25}$$

Supposons que le couple de valeurs (x_1, x_2) représente les coordonnées d'un point dans l'espace Cartésien. Dans le système de coordonnées polaires nous pouvons écrire ce couple sous la forme :

$$(x_1, x_2) = (r \cos(\theta), r \sin(\theta))\tag{2.26}$$

donc

$$dx_1 dx_2 = r dr d\theta\tag{2.27}$$

La transformation suivante est appliquée à la fonction de densité de probabilité :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}\right) dx_1 dx_2 &= \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) r dr d\theta \\&= \left[\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) r dr \right] \left[\frac{d\theta}{2\pi} \right]\end{aligned}\tag{2.28}$$

Nous remarquons que les variables r et θ sont indépendantes puisque la densité du couple est égale au produit des densités respectivement exponentielle pour la première variable et uniforme pour la deuxième variable sur l'intervalle $[0, 2\pi]$.

$$\begin{aligned}p(r) &= r \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) \\P(r) &= \int_0^r \exp\left(-\frac{r'^2}{2}\right) r' dr' = 1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)\end{aligned}\tag{2.29}$$

La variable r est alors générée par la méthode de la transformation inverse :

$$r = P^{-1}(y_2) = \sqrt{-2 \log_2(1 - y_2)}\tag{2.30}$$

La transformation résultante est décrite par les étapes suivantes :

$$(y_1, y_2) \rightarrow (r, \theta) \rightarrow (x_1, x_2)\tag{2.31}$$

La méthode de *Box-Muller* génère deux variables x_1 et x_2 , alors que pour certains problèmes une seule variable est déjà suffisante. Plusieurs travaux ont été basés sur cette approche pour générer une variable décrite par la loi normale [Lee et al. \(2006\)](#), [Thistleton et al. \(2007\)](#).

2.2.5.2 Méthode de rejet

Une deuxième méthode pour générer une variable aléatoire x à partir de la distribution $p(x)$, est basée sur une approche probabiliste. Pour une densité de probabilité $p(x)$, nous supposons connaître une fonction $q(x)$ qui satisfait $q(x) \geq p(x)$.

Nous supposons que nous pouvons également échantillonner une valeur x de la den-

sité $\hat{q}(x)$ définie par :

$$\hat{q}(x) = \frac{q(x)}{I[q]}, \quad I[q] = \int q(x') dx' \quad (2.32)$$

En pratique q est une constante. l'algorithme de la méthode de rejet consiste à tirer deux variables aléatoires, x' une variable d'essai suivant la densité de probabilité $\hat{q}(x')$ et y une variable de décision à densité de probabilité uniforme. Le critère pour accepter la valeur tirée de x' est le suivant :

- accepter si $0 < y < p(x')/q(x')$
- rejeter si $p(x')/q(x') < y < 1$

Le test précédant se répète tant que la valeur de x' est rejetée. Quand la condition est satisfaite x prendra la valeur de x' . Supposons que nous voulons générer une variable aléatoire de densité f à partir d'une densité de probabilité g définie par l'inégalité $f(x) \leq a.g(x)$, a est une constante. L'algorithme de la méthode de rejet simplifié est le suivant [Chazottes et al. \(2019\)](#) :

1. Un point $A = (x, y)$ est échantillonnée avec,
 - x est une variable aléatoire de loi de répartition G , par application de la méthode d'inversion nous obtenons $x = G^{-1}(u_1)$, u_1 est une variable aléatoire uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$.
 - $y = a.g(x).u_2$, u_2 est également une variable uniforme indépendante.
2. aller à l'étape (1) tant que $f(x) \leq y$.

Plusieurs avantages favorisent l'utilisation de la méthode de rejet pour générer une variable aléatoire, nous citons qu'elle ne nécessite pas l'inversion de la fonction de répartition $P(x)$, étape indispensable pour la méthode de transformation mais parfois complexe ou irréalisable. L'inconvénient principal de cette méthode est lié à son aspect aléatoire, qui consiste à répéter la procédure plusieurs fois avant de tirer une valeur acceptée.

Pour illustrer la méthode nous allons l'utiliser pour générer une variable aléatoire de loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$. Nous avons :

$$g(x) = \frac{\exp(-x^2/2)}{\sqrt{2\pi}} \leq \frac{\exp(\frac{1}{2} - |x|)}{\sqrt{2\pi}} \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.33)$$

On en déduit que :

$$\frac{(|x| - 1)^2}{2} \geq 0 \quad (2.34)$$

Or

$$\frac{\exp(-x^2/2)}{\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \exp(-|x|) = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \cdot l(x) \quad (2.35)$$

où l est la densité de la loi de *Laplace* standard.

Donc à partir de l'inégalité $g(x) \leq a.l(x)$, nous pouvons déduire que $a = \sqrt{\frac{2e}{\pi}}$.

L'expression inverse de la loi de répartition $L(x)$ en fonction d'une variable aléatoire

uniforme u dans l'intervalle $[-0.5, 0.5]$ s'écrit sous la forme :

$$L^{-1}(u) = -\text{sgn}(u) \cdot \log_2(1 - 2|u|) \quad (2.36)$$

$\text{sgn}(u)$ est la fonction signe de la variable aléatoire u sur son domaine de définition. L'algorithme simplifié ci-dessus permettra de générer une variable aléatoire gaussienne.

Une extension de cette approche, appelée algorithme de *Metropolis*, a été largement utilisée pour estimer les intégrales multidimensionnelles décrivant la moyenne des grandeurs physiques données par la formulation de *Gibbs* en physique statistique [Hayoun \(2002\)](#).

2.3 Généralités sur le transport de particules

L'exploitation des méthodes de MC dans le domaine de physique nucléaire fondamentale en général est liée directement à la modélisation de l'interaction du rayonnement avec la matière, dans le contexte d'une simulation nous parlons du transport de particules à travers la matière. Dans cette partie nous allons aborder une introduction basique sur les méthodes de modélisation adoptées dans le cas des photons et des particules chargées.

2.3.1 Transport de photons

Considérons un photon d'énergie E , traversant un milieu homogène. La probabilité $p(s)$ que ce photon interagisse avec le milieu après avoir parcouru la distance s , est décrite par la loi d'atténuation des photons :

$$p(s) = \mu(E) \exp(-\mu(E) \cdot s) \quad (2.37)$$

Le paramètre $\mu(E)$ est appelé coefficient d'atténuation linéique du milieu pour des photons d'énergie E . Le libre parcours moyen λ peut être calculé pour un milieu de dimension infinie par la formule :

$$\lambda = \int_0^\infty s \cdot p(s) ds = \mu(E) \int_0^\infty s \cdot \exp(-\mu(E) \cdot s) ds = \frac{1}{\mu(E)} \quad (2.38)$$

L'équation 2.40 permet d'exprimer la probabilité d'interaction des photons en fonction de τ nombre de libres parcours moyens sur la distance s :

$$\tau = \frac{s}{\lambda} = \mu(E) \cdot s \quad (2.39)$$

donc :

$$p(\tau) d\tau = \exp(-\tau) d\tau \quad (2.40)$$

Pour un milieu hétérogène le nombre de libres parcours moyens τ est défini par :

$$\tau = \sum_{\text{départ}}^P \mu_i(E) \cdot s_i \quad (2.41)$$

Pour calculer τ , le parcours du photon est considéré rectiligne à partir du point de *départ* situé à la surface du milieu constitué de régions i de compositions différentes, jusqu'au point d'interaction P . Les algorithmes de calcul du nombre de libres parcours moyens τ représentent une composante essentielle dans un code de simulation de transport de particules.

La fonction de répartition de la distribution $p(\tau)$ définie par l'équation 2.40 déduite à partir de la loi d'atténuation des photons, est donnée par :

$$P(\tau) = \int_0^\tau p(\tau') d\tau' = 1 - \exp(-\tau), \quad P(0) = 0, P(\infty) = 1 \quad (2.42)$$

Nous pouvons échantillonner $\tau_1 \cdot \lambda$, la distance vers le premier point d'interaction, par utilisation de la méthode de transformation. Considérons une variable aléatoire uniforme ζ_1 dans l'intervalle $[0, 1[$, donc τ sera exprimée en fonction de ζ_1 sous cette forme :

$$\zeta_1 = 1 - \exp(-\tau_1), \Rightarrow \tau_1 = -\log_2(1 - \zeta_1) \quad (2.43)$$

Une fois que le nombre de libres parcours moyens τ_1 est déterminé, en tenant compte de la géométrie du milieu, l'interaction est appliquée au point P . Les interactions prédominantes simulées sont : (A) l'*absorption photoélectrique*, (R) *diffusion Rayleigh*, (C) *diffusion Compton* et (p) la *matérialisation*. Ces effets sont représentés respectivement par leurs coefficients d'interaction qui dépendent du matériau traversé et de l'énergie du photon incident :

$$\mu(E) \equiv \mu_{\text{tot}}(E) = \mu_A(E) + \mu_R(E) + \mu_C(E) + \mu_p(E) \quad (2.44)$$

L'intervalle $[0, 1]$ sera divisé en quatre parties $[P_i, P_{i+1}[$, chacune correspondra à un type d'interaction :

$[P_0, P_1[$:	absorption photoélectrique	,	$P_0 = 0$
$[P_1, P_2[$:	diffusion Rayleigh	,	$P_1 = P_0 + \mu_A/\mu_{\text{tot}}$
$[P_2, P_3[$:	diffusion Compton	,	$P_2 = P_1 + \mu_R/\mu_{\text{tot}}$
$[P_3, P_4]$:	matérialisation	,	$P_3 = P_2 + \mu_c/\mu_{\text{tot}}, P_4 = P_3 + \mu_p/\mu_{\text{tot}} = 1$

Le type d'interaction est déterminé par une deuxième variable aléatoire ζ_2 , en fonction de la valeur échantillonnée. Les paramètres des particules secondaires produites suite à une interaction peuvent être calculées par la suite. Les énergies et les angles de diffusion des particules sont échantillonnés à partir des distributions statistiques qui dépendent de la section efficace différentielle. Pour tenir compte des lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion, le tirage aléatoire se fait par la méthode de rejet.

Les mêmes étapes seront répétées pour chaque rayonnement simulé. L'histoire de chaque photon inclut les interactions de toute particule secondaire créée. Le transport de chaque particule s'arrête dès qu'elle quitte l'espace simulée, ou dès que son

énergie atteint un seuil minimal défini en fonction du type de la particule et du milieu traversé. La distance entre deux points d'interaction successifs, est appelée *step*. Suite à chaque interaction les grandeurs d'intérêt sont calculées de manière cumulative; par exemple, la dose absorbée dans un volume élémentaire est égale à la somme des énergies déposées par toutes les particules simulées, divisée par la masse élémentaire du volume.

2.3.2 Transport des électrons et des positrons

2.3.2.1 Histoire condensée

La section précédente résume les concepts de base pour simuler le transport d'un photon à travers la matière. La notion du libre parcours moyen est beaucoup plus adaptée aux rayonnements ionisants sous forme de particules neutres (neutrons) ou sous forme d'énergie électromagnétique (photons). En radiothérapie par faisceaux de photons, le libre parcours moyen peut atteindre les 10 cm dans l'eau [Seco & Verhaegen \(2013\)](#). La probabilité d'interaction d'un photon est très inférieure à celle d'une particule chargée de même énergie passant à travers le même milieu.

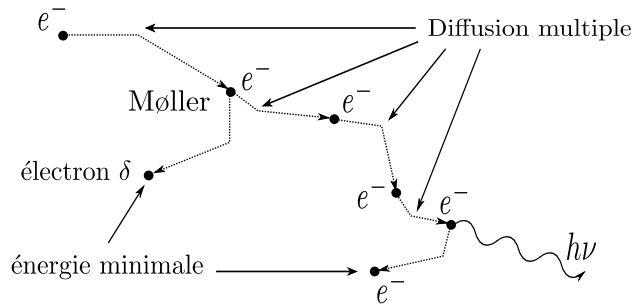


FIGURE 2.1: Histoire d'un électron primaire ayant subi des diffusions multiples sur sa trajectoire [Seco & Verhaegen \(2013\)](#).

Les particules chargées subissent un très grand nombre d'interactions, par conséquent la simulation d'une seule particule (électron, positron, proton) nécessitera un temps de calcul nettement supérieur à celui demandé pour un seul photon. Donc, l'approche du libre parcours moyen trouvera ces limites dans ce cas.

La collision élastique est le type d'interaction le plus probable en ce qui concerne les particules chargées. Le transfert d'énergie est très faible durant chaque interaction coulombienne, le changement de direction se fait également suivant des angles de diffusion infinitésimaux. L'ensemble des collisions élémentaires sont donc regroupées en un seul *step* appelé *histoire condensée*. Cette technique a été implémentée par [Berger \(1963\)](#), elle est actuellement mise en œuvre dans tous les codes MC de transport de particules [Sempau et al. \(2000\)](#), [Kawrakow \(2000a\)](#).

L'implémentation actuelle divise les interactions d'une particule chargée en deux catégories, *hard interactions* et *soft interactions*. Un seuil arbitraire de l'énergie

cinétique E_c est utilisé pour déterminer le type de l'interaction. Les collisions du type *soft* sont simulées implicitement par un transfert continu d'une énergie inférieure à E_c au milieu environnant. Les changements de direction suite à une série de diffusions avec des petits angles sont approximés par un seul angle de diffusion représentant toutes les collisions le long du *step*. Les collisions du type *hard* entraînent la production de particules secondaires, elles sont simulées explicitement par la même méthode utilisée pour les photons. La valeur minimale de l'énergie transférée aux particules secondaires suite à une "dure" collision (*hard*) est supérieure à E_c , ce qui permet d'estimer la portée de la particule créée. La précision sur la grandeur calculée à l'issue d'une simulation dépendra fortement de la valeur E_c , souvent appelée seuil de production de particules secondaires.

L'approche approximative de l'*histoire condensée* fait appel à un autre paramètre d'optimisation limitant la longueur maximale du *step*, généralement noté $s_{\max}$. Dans plusieurs codes Monte Carlo, ce paramètre est calculé en fonction du pouvoir d'arrêt du matériau traversé pour l'énergie de la particule en mouvement.

Le parcours d'un électron simulé par la technique de l'*histoire condensée*, est constitué de plusieurs segments de droite fig.2.1. La diffusion Møller [Anthony et al. \(2005\)](#) produit des électrons δ de faible énergie, la boucle de transport de l'électron se répète tant que son énergie est supérieure à la valeur seuil E_{cut} prédéfinie et tant qu'il n'a pas quitté les limites de la géométrie simulée.

2.3.2.2 Pouvoir d'arrêt restreint

Les interactions de type *soft* d'une particule chargée se traduisent par un processus de perte d'énergie sans création de particules secondaires, cependant les interactions *hard* génèrent les particules secondaires lorsque le transfert énergétique est supérieure à l'énergie limite E_c . L'énergie élémentaire moyenne dE perdue par *step* d'histoire condensée ds en un point $\vec{r}$ est décrite par le pouvoir d'arrêt linéique :

$$L(\vec{r}, E, E_c, k_c) \equiv - \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\text{res}} = L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c) + L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k_c) \quad (2.45)$$

$-\left(\frac{dE}{ds}\right)_{\text{res}}$ pouvoir d'arrêt restreint, appelé également transfert linéique d'énergie, exprimé en fonction de deux composantes.

$L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c)$ correspond à la perte d'énergie par collisions de type *hard* et *soft*.

$L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k_c)$ correspond à la perte d'énergie par émission de rayonnement électromagnétique. Seuls les électrons et les positrons peuvent générer le rayonnement de freinage en quantité significative puisque le taux de production varie à l'inverse de la masse de la particule considérée [Attix \(2008\)](#).

k_c est un paramètre utilisé, comme pour E_c , pour différencier les interactions *soft* et *hard* classifiant la production du rayonnement de freinage *bremsstrahlung*.

avec :

$$L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c) \equiv - \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\text{res,col}}, \quad L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c) \equiv - \left(\frac{dE}{ds} \right)_{\text{res,col}} \quad (2.46)$$

Une particule chargée perd son énergie suivant deux modes distincts, par collision ou par rayonnement eqs.2.45, 2.46. Cette perte d'énergie s'exprime en fonction des sections efficaces d'interaction de collision et de freinage *bremsstrahlung* respectivement $\sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E)$ et $\sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E)$:

$$\begin{aligned} L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c) &= N(\vec{r}) \int_0^{E_c} E' \sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E) dE' \\ L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k_c) &= N(\vec{r}) \int_0^{k_c} E' \sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E) dE' \end{aligned} \quad (2.47)$$

$N(\vec{r})$ est le nombre d'atomes cible par unité de volume dans lequel le point $\vec{r}$ est situé. Nous pouvons noter que l'énergie transférée aux particules secondaires est inférieure à E_c et à k_c .

La longueur du *step* s pour un électron ayant l'énergie initiale E_0 et qui a perdu la quantité ΔE peut se calculer par l'intégrale suivante :

$$s = - \int_{E_0}^{E_1} \frac{dE}{L(\vec{r}, E, E_c, k_c)} = \int_{E_1}^{E_0} \frac{dE}{L(\vec{r}, E, E_c, k_c)} \quad (2.48)$$

$E_1 = E_0 - \Delta E$ est l'énergie de l'électron à l'issue du *step*. L'intégrale eq.2.48 est calculée tout au long du parcours de l'électron, en tenant compte des changements de densité et de composition lorsque la particule traverse l'interface entre deux milieux. En réalité tout électron qui a initialement l'énergie E_0 devrait toujours terminer le *step* avec l'énergie E_1 , or l'aspect aléatoire du transfert d'énergie introduit des fluctuations sur la valeur de l'énergie E_1 . Cet effet est connu sous le nom *energy straggling* Bonderup & Hvelplund (1971), Chu (1976). Pour prendre en considération ce phénomène plusieurs théories sont implémentées et incorporée dans les différents codes de transport de particules Andreo & Brahme (1984), Baro et al. (1995).

2.3.2.3 Diffusion multiple

L'approche de l'*histoire condensée* modélise le parcours d'une particule chargée par un segment de droite fig.2.2. L'effet de plusieurs collisions élastiques sur le déplacement latéral de la particule est simulé par l'échantillonnage d'un seul angle de diffusion totale, basé sur l'une des modèles théoriques de la diffusion multiple Scott (1963).

Le parcours de l'histoire condensée peut montrer un écart transversal comparé au parcours réel de la particule fig.2.2, d'où la nécessité d'appliquer une correction. Plusieurs algorithmes correctifs ont été développés en ce sens, nous citons l'implémentation intégrée au code PENELOPE Salvat (2014).

La théorie de *Fermi* et *Eyges* Eyges (1948), modélise la probabilité de diffusion d'un électron dans l'espace délimité par l'angle solide de diffusion, avec une distribution *gaussienne* 2D eq.2.49 :

$$p(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{\theta}{\pi \overline{\theta^2}(s)} \exp\left(-\frac{\theta^2(s)}{\overline{\theta^2}(s)}\right) d\theta d\varphi \quad (2.49)$$

θ et φ sont respectivement l'angle azimutal et l'angle polaire de la diffusion multiple. $\overline{\theta^2}(s)$ est la moyenne du carré de l'angle θ à la fin du *step* s .

La fonction de répartition de la densité de probabilité $p(\theta, \varphi)$ eq.2.49 est composé de deux termes indépendants eq.2.50 :

$$P_\theta(\theta) = 1 - \exp\left(-\frac{\theta^2}{\overline{\theta^2}(s)}\right), \quad P_\varphi(\varphi) = \frac{\varphi}{2\pi} \quad (2.50)$$

La détermination de la valeur de θ se fait par un tirage aléatoire et par application de la méthode de transformation, basée sur le calcul de la fonction de répartition l'eq.2.50.

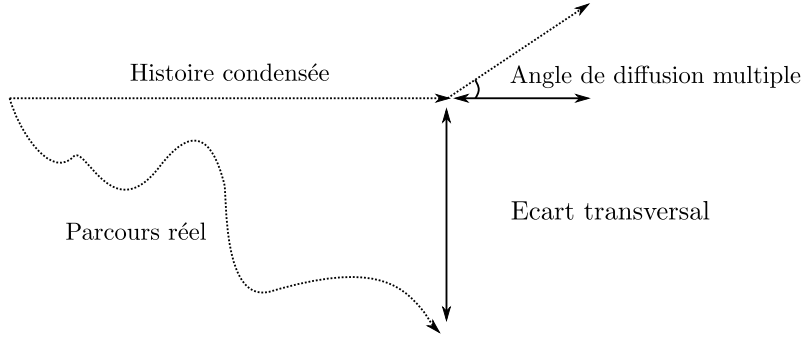


FIGURE 2.2: Comparaison entre le parcours réel d'un électron en mouvement dans un milieu et le parcours estimé par la méthode de l'histoire condensée. La présence d'écart transversal nécessite l'application d'une correction au parcours de l'histoire condensée [Seco & Verhaegen \(2013\)](#).

$$\theta = \sqrt{-\overline{\theta^2}(s) \log_2(1 - \zeta_\theta)} \quad (2.51)$$

ζ_θ est une variable aléatoire uniformément distribuée sur l'intervalle $[0, 1[$.
 φ est échantillonnée d'une distribution uniforme sur l'intervalle $[0, 2\pi]$.

La grandeur $\overline{\theta^2}(s)$ est calculée en fonction du pouvoir de diffusion $T_s(\vec{r}, E)$ du milieu dans lequel se trouve le point $\vec{r}$:

$$\overline{\theta^2}(s) = \int_0^s T_s(s', E) ds' \quad (2.52)$$

Le pouvoir de diffusion linéique $T_s(\vec{r}, E)$ est une notion utilisée pour modéliser les diffusions multiple d'une particule chargée dues aux interactions coulombiennes [Gottschalk \(2010\)](#). La valeur de $T_s(\vec{r}, E)$ dépend de la densité et la composition du milieu ainsi que de l'énergie de l'électron transporté.

La distribution *gaussienne* proposée dans l'eq.2.49 est l'une des approximations utilisées pour estimer l'angle de diffusion θ cumulé après plusieurs faibles déviations [Hanson et al. \(1951\)](#), cependant, pour les grandes valeurs le modèle atteint ses limites. Les nouvelles versions des codes MC existants se basent sur l'implémentation des modèles de *Goudsmit-Saunderson* [Goudsmit & Saunderson \(1940\)](#) et de *Molière* décrits dans sa théorie sur la diffusion des particules chargées [Bethe \(1953\)](#). Les récents algorithmes adoptés ont surmonté cette difficulté même pour les grands angles de diffusion.

2.3.2.4 Effet de l'hétérogénéité du milieu

Le transport d'une particule chargée avec les techniques de la diffusion multiple et de l'*histoire condensée* donne de très bons résultats dans un milieu homogène. En réalité le milieu traversé par la particule contiendra des hétérogénéités. Le dépôt d'énergie sera donc fortement influencé par les variations de densité et changements éventuels du milieu, également le parcours de l'électron changera en fonction de ces facteurs.

La figure 2.3 schématise la différence entre le parcours réel de l'électron passant par les milieux I et II et le parcours de l'*histoire condensée* passant uniquement par le milieu I. Par définition l'*histoire condensée* est appliquée pour alléger la simulation en réduisant le nombre de déflexions élémentaires simulées, plusieurs collisions sont regroupées en un seul *step* caractérisé par une déviation de la trajectoire accompagnée d'une perte d'énergie cinétique de l'électron en mouvement. Une longueur importante du *step* entraînera une large différence en termes de parcours et en termes de perte d'énergie, chose qui peut influencer la précision de la simulation surtout lorsque la dimension de l'hétérogénéité est inférieure à la valeur du pas effectué pour la diffusion de l'électron considéré.

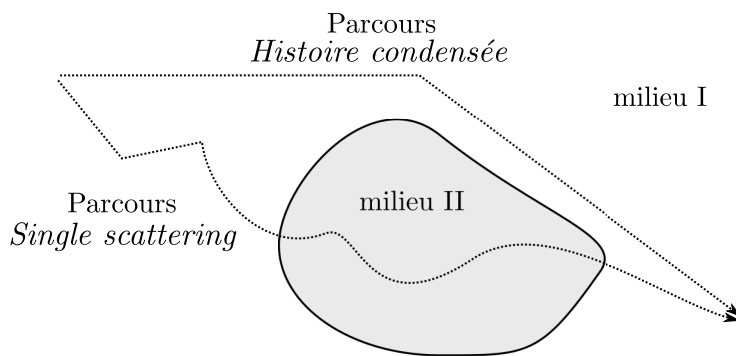


FIGURE 2.3: Différence entre le parcours d'un électron calculé par la méthode *single scattering* et le parcours de l'*histoire condensée*, dans une géométrie contenant des hétérogénéités.

Pour éviter ce genre de problème l'*histoire condensée* n'est utilisée que lorsque la distance entre l'électron et l'interface d'un milieu est supérieure à la valeur du *step*. Un paramètre souvent appelé $s_{\max}$ permettra de contrôler la longueur maximale du pas. Un ajustement automatique de sa valeur est effectué par l'algorithme de transport, il le réduit lorsque l'électron s'approche de l'interface et il l'augmente inversement lorsque la particule s'éloigne fig.2.4, cette technique a été implémentée pour la première fois dans le code EGS/PRESTA Bielaiew & Rogers (1986). La présence importante de structures hétérogènes de très petites dimensions déclenche un processus d'ajustement réduisant le pas de déplacement élémentaire à des valeurs infinitésimales. Par conséquent, le calcul devient excessivement long. Un nouveau paramètre $s_{\min}$, représentant le pas minimal, permettra d'éviter un *step* infini

petit. Cependant, cette dernière contrainte limitant le *step* peut donner lieu à des artefacts similaires à ce qui est montré sur la figure 2.3.

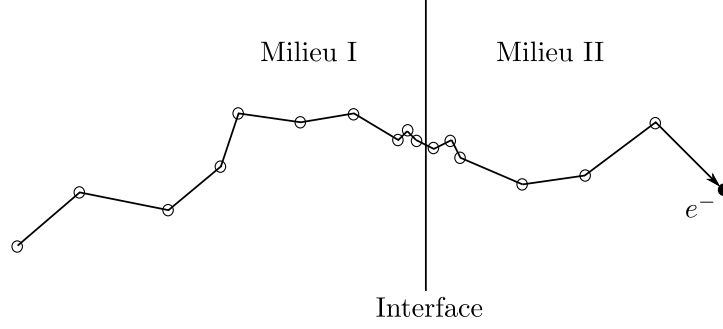


FIGURE 2.4: Ajustement automatique de la longueur du *step* de la particule chargée en fonction de la distance à la prochaine bordure.

Pour résoudre ce problème un algorithme plus précis a été introduit dans le code EGSnrc [Kawrakow \(2000a\)](#). Un paramètre $d_{\min}$ est instancié pour éliminer l’artefact lié à la longueur du *step*, une fois la distance entre l’électron et la prochaine interface est inférieure à $d_{\min}$, l’algorithme de calcul utilise la technique du *single scatter* [Bielajew \(1994\)](#), les pertes en énergie sont calculées avec beaucoup plus de précision même pour une particule de faible énergie [Kawrakow \(2000b\)](#).

2.3.3 Section efficace

La probabilité de diffusion d’une particule suite à une interaction avec une cible est souvent exprimée par une grandeur appelée “section efficace”. Nous considérons un faisceau de particules étroit et parallèle irradiant un matériau d’épaisseur x et de masse volumique ρ . Le nombre d’interactions N_{evts} s’écrit en fonction de σ sous la forme :

$$\begin{aligned} N_{\text{evts}} &= N_p \cdot N(\vec{r}) \cdot x \cdot \sigma = N_p \cdot \frac{\rho \cdot x \cdot \mathcal{N}_A}{M} \sigma \\ \sigma[\text{cm}^2] &= \frac{N_{\text{evts}} \cdot M}{N_p \cdot \rho \cdot x \cdot \mathcal{N}_A} \end{aligned} \quad (2.53)$$

N_p est le nombre de particules incidentes du faisceau.

$N(\vec{r})$ est le nombre de particules cible par unité de volume.

M est la masse molaire de l’élément constituant la cible.

$\mathcal{N}_A$ est la constante d’Avogadro.

Nous pouvons définir également la section efficace différentielle [Wong \(2008\)](#), probabilité d’interaction en fonction de l’orientation, après interaction de la particule projectile avec la cible eq.2.54 :

$$P(\theta, \varphi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (2.54)$$

L'équation précédente traduit la probabilité de détecter une particule diffusée par un détecteur à la position (θ, φ) et couvrant l'angle solide $\Delta\Omega$. La section efficace totale est calculée en intégrant l'eq.2.54 :

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta d\varphi \quad (2.55)$$

2.3.3.1 Coefficient d'interaction des photons

Le coefficient d'atténuation des photons $\mu(E)$ a été introduit au début de cette partie pour calculer la distance entre deux d'interactions successives. Ce paramètre s'exprime en fonction de la section efficace d'interaction $\sigma_i(E)$ de l'élément i sous la forme :

$$\mu(E) = \sum_i N_i(\vec{r}) \sigma_i(E) \quad (2.56)$$

$N(\vec{r})$ est le nombre d'atomes par unité de volume de l'élément i , calculé par :

$$N_i(\vec{r}) = \frac{\rho(\vec{r}) \cdot w_i(\vec{r})}{m_u \cdot A_i(\vec{r})} = \frac{\rho(\vec{r}) \cdot \mathcal{N}_A \cdot w_i(\vec{r})}{M_i(\vec{r})} \quad (2.57)$$

$\rho(\vec{r})$ la masse volumique du matériau, $w_i(\vec{r})$, $A_i(\vec{r})$, $M_i(\vec{r})$, m_u et $\mathcal{N}_A$ sont respectivement la fraction de l'élément i au point d'interaction $\vec{r}$, le nombre de masse atomique, la masse molaire, l'unité de masse atomique et la constante d'Avogadro.

D'après l'équation 2.44, la section efficace totale s'exprimera en fonction des sections efficaces des quatre modes d'interactions, (*A*) *absorption photoélectrique*, (*R*) *diffusion Rayleigh*, (*C*) *diffusion Compton* et (*P*) *production de paires* :

$$\sigma_i(E) = \sigma_{i,A}(E) + \sigma_{i,R}(E) + \sigma_{i,C}(E) + \sigma_{i,P}(E) \quad (2.58)$$

La détermination de la composition exacte du milieu, permettra de calculer avec plus de précision les sections efficaces pour chaque processus d'interaction en fonction de l'énergie des photons. Des bibliothèques de données de section efficace à accès publique régulièrement actualisées [Cullen et al. \(1997\)](#), [Berger & Hubbell \(1987\)](#), sont incorporées dans plusieurs codes MC de transport de particules.

En radiothérapie le milieu d'interaction traversé par les photons est le corps du patient, les densités sont déterminées à partir du nombre *Hounsfield* [Rho et al. \(1995\)](#). La *Commission Internationale des Unités et Mesures Radiologiques* ([ICRU](#)) a établi une base de données de sections efficaces dédiée, comportant des valeurs pour 100 types de tissus humains, publiées dans le rapport N° 46 [Bethesda \(1992\)](#).

L'une des approches exploitée pour le calcul MC propose d'utiliser la probabilité d'interaction par unité de longueur, $\mu_k(E, \rho)$ eq.2.59 exprimée en fonction de la densité du milieu sans connaître sa composition atomique [Kawrakow et al. \(1996\)](#), [Fippel \(1999\)](#).

$$\mu_k(E, \rho) = \frac{\rho}{\rho_w} f_k(\rho) \cdot \mu_k^w(E) \quad (2.59)$$

$\mu_k^w(E)$ est le coefficient d'interaction de l'eau et ρ_w est la masse volumique de l'eau.

$f_k(\rho)$ est le rapport des sections efficaces d'interaction établi en fonction de la masse volumique du milieu d'interaction.

Des modèles mathématiques basés sur les données publiées par l'ICRU, expriment $f_k(\rho)$ pour chaque effet indépendamment des autres. Par exemple la fonction d'ajustement pour l'effet compton est écrite sous la forme suivante :

$$f_C(\rho) = \begin{cases} 0.99 + 0.01 \frac{\rho}{\rho_w}, & \rho \leq \rho_w \\ 0.85 + 0.15 \frac{\rho_w}{\rho}, & \rho \geq \rho_w \end{cases} \quad (2.60)$$

L'erreur relative entre l'équation 2.60 et les données tabulées du rapport N° 46 de l'ICRU, est inférieure à 1%. Des modèles mathématiques similaires permettront de calculer inversement les sections efficaces correspondantes pour les différents types d'interaction.

2.3.3.2 Pouvoir d'arrêt des particules chargées

La simulation du transport de particules chargées par la méthode de MC, nécessite impérativement la détermination du pouvoir d'arrêt restreint (transfert linéique d'énergie) par collision $L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c)$ et par rayonnement $L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, E_c)$ eq.2.45. Ces grandeurs sont calculées en termes du pouvoir d'arrêt non-restreint du milieu $S_{\text{col}}(\vec{r}, E)$ et $S_{\text{ray}}(\vec{r}, E)$ pour une particule d'énergie E . Le pouvoir d'arrêt non-restreint exprime la perte d'énergie dE moyenne par unité de longueur élémentaire ds (*step*). Le pouvoir d'arrêt total non-restreint est défini par :

$$S(\vec{r}, E) = - \left(\frac{dE}{ds} \right) = S_{\text{col}}(\vec{r}, E) + S_{\text{ray}}(\vec{r}, E) \quad (2.61)$$

$S_{\text{col}}(\vec{r}, E)$ et $S_{\text{ray}}(\vec{r}, E)$ sont calculés en fonction de la section efficace de collision inélastique $\sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E, E')$ et de la section efficace de production de rayonnement de freinage $\sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k')$ eq.2.62 :

$$\begin{aligned} S_{\text{col}}(\vec{r}, E) &= N(\vec{r}) \int_0^E \sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E, E') E' dE' \\ S_{\text{ray}}(\vec{r}, E) &= N(\vec{r}) \int_0^E \sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k') k' dk' \end{aligned} \quad (2.62)$$

$N(\vec{r})$ est le nombre d'atomes par unité de volume au point d'interaction $\vec{r}$ calculé par l'eq.2.57. E' et k' seuils de différenciation entre les deux classe d'interactions *hard* et *soft*.

Les pouvoirs d'arrêt restreints par collisions inélastiques et par rayonnement *bremssstrahlung* respectivement $L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c)$ et $L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k_c)$, sont calculés en fonction des sections efficaces $\sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E, E')$ et $\sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k')$ pour des transferts énergétiques $E' > E_c$ et $k' > k_c$ respectivement. En considérant les équations 2.47 et 2.62, le pouvoir d'arrêt restreint s'écrit sous la forme montrée dans l'équation 2.63.

Les valeurs tabulées du pouvoir d'arrêt utilisées pour la simulation du dépôt de

dose par la méthode de MC en radiothérapie, sont publiées par l'ICRU, pour les électrons et les positrons, dans le rapport N° 37 [ICRU \(1984\)](#). Également, les tables pour d'autre particules chargées sont données dans le rapport N° 49 [ICRU \(1993\)](#). D'autres bases de données validées sont aussi utilisées pour déterminer les pouvoirs d'arrêt de différents tissus [Berger et al. \(1993\)](#), [Amako et al. \(2005\)](#).

$$\begin{aligned} L_{\text{col}}(\vec{r}, E, E_c) &= S_{\text{col}}(\vec{r}, E) - N(\vec{r}) \int_{E_c}^E \sigma_{\text{col}}(\vec{r}, E, E') E' dE \\ L_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k_c) &= S_{\text{ray}}(\vec{r}, E) - N(\vec{r}) \int_{k_c}^E \sigma_{\text{ray}}(\vec{r}, E, k') k' dk' \end{aligned} \quad (2.63)$$

Une modélisation mathématique directe similaire à celle montrée dans l'équation 2.59 a été établie pour déterminer le pouvoir d'arrêt par collision et par rayonnement en fonction du rapport de sections efficaces $f_k(E, \rho)$ et du pouvoir d'arrêt massique de l'eau eq.2.64.

$$S_k(E, \rho) = \frac{\rho}{\rho_w} \cdot f_k(E, \rho) \cdot S_k^w(E) \quad (2.64)$$

Cette approche a été utilisée dans un code de simulation pour le calcul du dépôt de dose des faisceaux de protons [Fippel & Soukup \(2004\)](#). L'algorithme de calcul utilise une fonction d'ajustement eq.2.65 basée sur l'analyse des tables de pouvoir d'arrêt de l'ICRU publiées dans les rapports N° 46 et 49, et la base de données de sections efficaces PSTAR [Berger \(1999\)](#) :

$$f_s(E, \rho) = \begin{cases} 1.0123 - 3.386 \cdot 10^{-5} E + 0.291(1 + E^{0.3421})(\rho^{-0.7} - 1) & , \rho \geq 0.9 \\ 0.9925 & , \rho = 0.26 \text{ (poumon)} \\ 0.8815 & , \rho = 0.0012 \text{ (air)} \\ \text{Interpolation linéaire} & , \rho \leq 0.9 \end{cases} \quad (2.65)$$

E est l'énergie cinétique de la particule, ρ est la masse volumique en g.cm^{-3} . L'erreur relative entre la fonction eq.2.65 et les valeurs tabulées de l'ICRU est de l'ordre 1%.

2.4 Utilisation des méthodes Monte Carlo en radiothérapie externe

Historiquement, les méthodes de calcul Monte Carlo ont été utilisées pour modéliser les accélérateurs linéaires médicaux en mode photons depuis les années 1970 [Terrissol & Patau \(1978\)](#), [Nilsson & Brahme \(1981\)](#). Les premiers modèles simplifiés pour le mode électron ont été développés vers la fin des années 1980 [Udale \(1988\)](#). Parallèlement, l'élaboration de code Monte Carlo avec une interface graphique utilisateur, a facilité l'introduction de l'approche modulaire dans la simulation de la tête d'irradiation d'un accélérateur [Rogers et al. \(1995\)](#).

Nous nous limiterons dans cette partie à une brève description des techniques de modélisation les plus citées dans la littérature.

2.4.1 Modélisation directe de l'accélérateur linéaire médical

Généralement, la simulation du faisceau de l'accélérateur se compose de trois étapes : (i) une modélisation fidèle à la géométrie et à la composition atomique de chaque élément de la tête d'irradiation fig.2.5 ; (ii) simulation du transport de particules à travers la géométrie modélisée ; et puis (iii) ajustement des paramètres de la source d'électrons primaires. La précision de la simulation est fortement influencée par les paramètres intervenant dans chacune de ces trois étapes, la connaissance de la marge d'erreur sur chaque paramètre permettra d'estimer l'incertitude sur le résultat final.

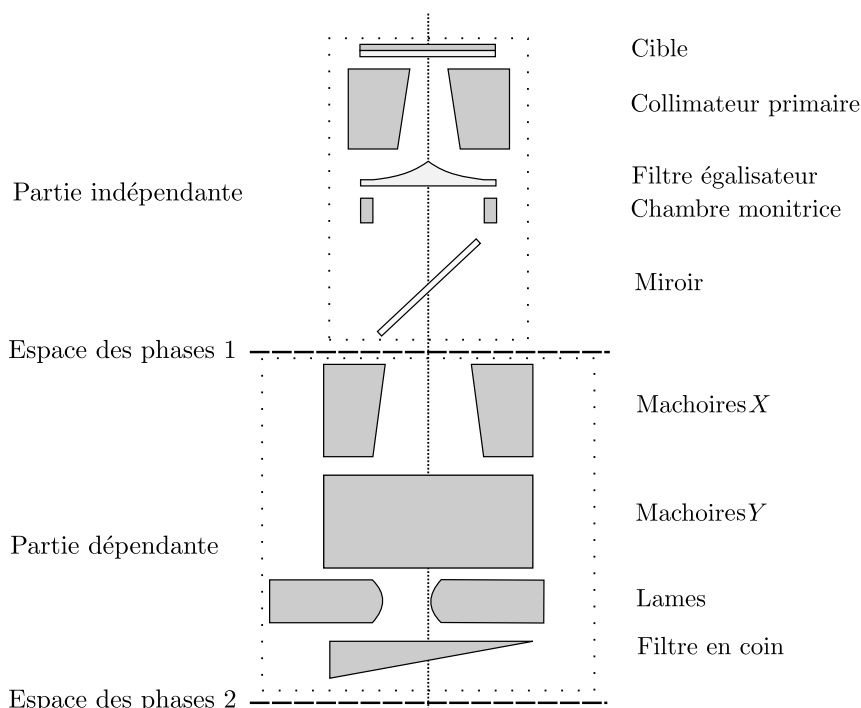


FIGURE 2.5: Représentation schématique des composantes modélisées généralement pour simuler par la méthode de Monte Carlo la tête d'irradiation d'un accélérateur linéaire médical.

La description des composantes de la tête d'irradiation d'une configuration commercialisée d'accélérateur linéaire est une information confidentielle protégée par le constructeur. L'autorisation et l'accord des parties concernées sont indispensables pour en avoir l'accès. Cependant, lorsque la géométrie est modélisée, la validation de la simulation est effectuée à travers un processus de comparaison récursif entre les grandeurs calculées et les données de référence souvent sous forme de mesures expérimentales Chaney et al. (1994), Deng et al. (2000).

Le package Monte Carlo BEAM/EGS mis à disposition des utilisateurs en 1995 Rogers et al. (1995), amélioré et distribué par la suite sous le nom BEAMnrc Kawrakow & Walters (2006), est le code MC le plus utilisé pour la simulation des accélérateurs linéaires en physique médicale. BEAMnrc est caractérisé par une interface graphique facilitant la modélisation des faisceaux d'électrons et de photons. Le code inclut une large base de données de sections efficaces permettant de simuler plusieurs matériaux, il est aussi connu par la précision de ses modèles de transport des photons,

des électrons et des positrons. Toutes les informations concernant l’histoire d’une particule sont récupérables, ce qui permet de faire une analyse détaillée du faisceau [Seco & Verhaegen \(2013\)](#).

2.4.1.1 Détermination des caractéristiques de la source des électrons primaires

Les processus de génération, accélération et focalisation du faisceau d’électrons ne sont pas simulés en général. En revanche, la description des propriétés de la source des électrons primaires se fait par échantillonnage direct à partir de fonctions de densité de probabilité. La caractérisation est décrite par deux paramètres principaux, la distribution spatiale et la distribution en énergie des électrons.

[Verhaegen et Seuntjens](#) ont souligné dans leur travail qu’une variation de 0.2 MeV de l’énergie moyenne des électrons primaires induit un effet remarquable sur les courbes de rendement en profondeur et de profil de dose [Verhaegen & Seuntjens \(2003\)](#). Cependant, la largeur de la distribution spatiale des particules (spot) agit plus sur la forme des profils de dose [Toutaoui et al. \(2014\)](#). Des mesures de la taille du spot électronique ont montré une forme généralement circulaire ou elliptique pour certaines configurations [Munro et al. \(1988\)](#).

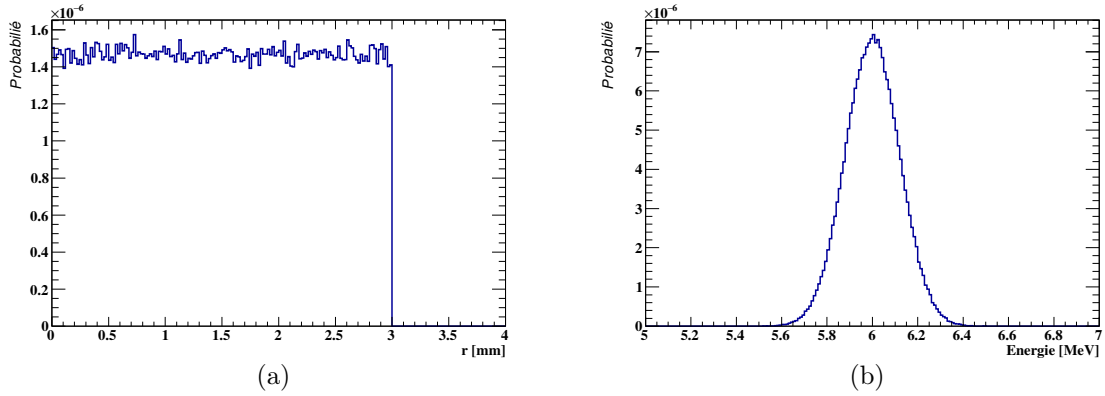


FIGURE 2.6: Tirage de la position r et de l’énergie E de 3.10^6 électrons primaires. (a) : Distribution spatiale uniforme de rayon maximal $r_{max} = 3$ mm. (b) Spectre *gaussien* d’une énergie moyenne $E_0 = 6$ MeV, $\sigma = 2\%.E_0$.

La distribution spatiale des électrons primaires peut être approximée par une loi uniforme sur l’intervalle $[0, r]$, r est le rayon du faisceau étroit d’électrons primaires spécifié par le constructeur fig.2.6 (a) [Lovelock et al. \(1995\)](#). D’autres auteurs ont utilisé la loi normale pour générer la position d’un électron primaire [Sheikh-Bagheri & Rogers \(2002\)](#). La distribution énergétique est approximée par une loi *gaussienne* $G(E|E_0, \sigma_E)$ d’une énergie moyenne E_0 et d’écart type σ_E fig.2.6 (b) :

$$G(E|E_0, \sigma_E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma_E^2}\right) \quad (2.66)$$

L’ajustement de la valeur moyenne E_0 et de l’écart type σ_E se fait le plus souvent suivant la démarche de [Verhaegen et Seuntjens](#). La première phase consiste à

déterminer l'énergie moyenne E_0 en effectuant une série de calculs pour plusieurs valeurs, ensuite le rendement de dose en profondeur simulé est comparé avec la courbe mesurée de référence pour un champ carré de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, l'écart type de la distribution σ_E a très peu d'effet sur l'indicateur de dose correspondant. Dans la deuxième phase, l'écart type de la distribution spatiale *gaussienne* est ajusté en effectuant une comparaison des distributions de dose.

2.4.1.2 Simulation des photons de freinage

Le faisceau de photons d'une énergie allant de 4 à 25 MeV, est une conséquence du freinage des électrons par une cible de haute densité. L'épaisseur de la cible devrait être optimale permettant de produire le rayonnement *bremsstrahlung* et d'arrêter au maximum les électrons primaires du faisceau.

Plusieurs théories ont été développées pour prédire la distribution énergétique et angulaire des photons *bremsstrahlung* Koch & Motz (1959), Desobry & Boyer (1991). Pour une cible épaisse les modèles théoriques manquent de précision, par contre la méthode de MC largement utilisée pour ce genre de situation, reste la plus adaptée pour calculer les propriétés, à caractère statistique, des photons de freinage. La première simulation MC du processus *bremsstrahlung* par un code non distribué, remonte à l'année 1978 Terrissol et al. (1978), un faisceau d'électrons mono-énergétiques de 5.7 MeV est freiné par une cible Tungsten/Cuivre, suivie d'un filtre égalisateur en plomb et d'un collimateur. Une étude sur l'effet de la composition de la cible sur les spectres en énergie du rayonnement de freinage a été effectuée en utilisant le code EGS3 Ford & Nelson (1978).

Quelques années plus tard, Le *National Research Council au Canada* (NRCC), a intégré des méthodes d'échantillonnage de distributions angulaires du rayonnement de freinage basées sur les fonctions de Koch et Motz Koch & Motz (1959), Bielajew et al. (1989). Avant les années 1960 l'échantillonnage se faisait par une approximations estimant la distribution angulaire moyenne, en fonction du rapport de l'énergie de masse de l'électron au repos et de son énergie totale, par la formule :

$$\vartheta = \frac{m_0 c^2}{E} \quad (2.67)$$

Cette approximation a été vérifiée par plusieurs mesures expérimentales des distributions angulaires et spectres en énergie Faddegon et al. (1991). Un accord raisonnable a été obtenu, cependant l'évaluation et l'estimation des sections efficaces du *bremsstrahlung* fait toujours l'objet d'une amélioration continue Poon & Verhaegen (2005).

2.4.1.3 Aplatissement du faisceau

La fluence du faisceau de photons généré après freinage est initialement plus intense au centre du faisceau fig.2.7. Pour aplatir la distribution spatiale des photons, deux techniques sont utilisées, la première consiste à balayer la surface à irradier avec

un champ de petites dimensions [Humm et al. \(1996\)](#), [Dirkx & Heijmen \(2000\)](#) ; la deuxième consiste à équiper l'accélérateur linéaire d'une composante conique appelée "filtre égalisateur" positionnée en dessous de la cible [fig.2.5](#), permettant d'atténuer le faisceau pour égaliser la fluence. La distribution de dose à 10 cm de profondeur, est fortement influencée par la géométrie et la composition du filtre. Plusieurs travaux ont montré l'effet du cône égalisateur sur la fonction de densité de probabilité spatiale et énergétique des photons.

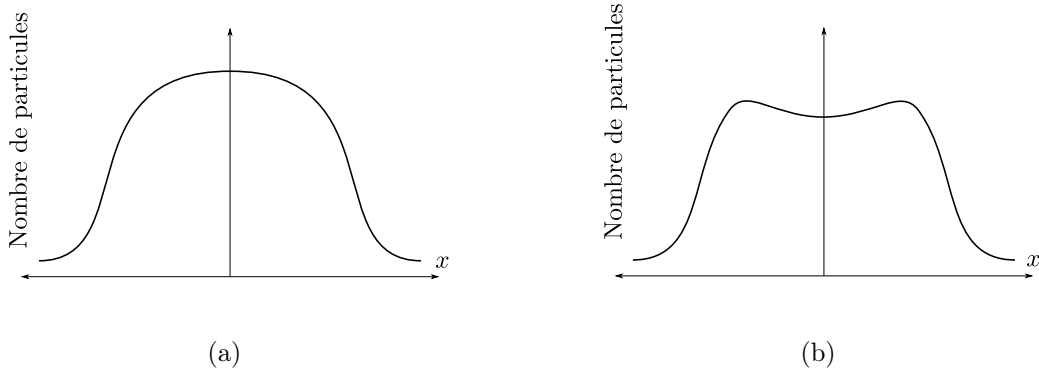


FIGURE 2.7: Représentation de l'effet du filtre égalisateur sur la distribution spatiale des photons de freinage sous le collimateur primaire. (a) : fluence des photons issus directement de la cible de l'accélérateur ; (b) : fluence des photons de freinage atténués par le filtre égalisateur.

L'étude faite par *McCall et al.* montre clairement l'influence de la composition du cône, plusieurs simulations ont été effectuées pour trois matériaux différents l'aluminium, le nickel et le tungstène [McCall et al. \(1978\)](#). Sur la base des résultats obtenus, ils ont suggéré d'adapter la densité du filtre égalisateur en fonction de l'énergie du faisceau de photons. La forme géométrique du cône égalisateur change également en fonction de l'énergie [fig.2.8 González et al. \(2015\)](#).

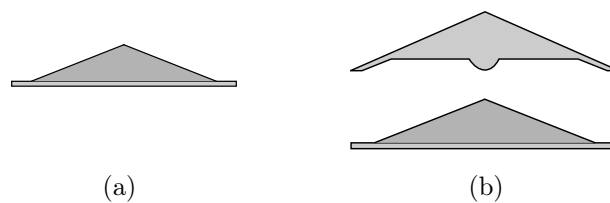


FIGURE 2.8: Géométrie du filtre égalisateur de l'accélérateur linéaire *Elekta Precise*. (a) : cône du faisceau 6 MV ; (b) : cône du faisceau 18 MV.

2.4.1.4 Collimation du faisceau

Les accélérateurs linéaires utilisent pour conformer le faisceau de photons généré par freinage des électrons et aplatit par le filtre égalisateur, un dispositif appelé collimateur secondaire, capable de faire une rotation de 2π autour de l'axe du faisceau. Le collimateur est composé de deux parties principales :

- **Mâchoires X/Y** en formes de bloc en tungstène, leur épaisseur peut changer en fonction du type de l'accélérateur. Le déplacement de chaque couple de mâchoires selon l'axe X ou Y, permet de convertir le faisceau de symétrie circulaire en champs d'irradiation carré ou rectangulaire. Les investigations faites pour estimer le pourcentage de rayonnement diffusé par les mâchoires indiquent des valeurs de l'ordre de 0.2% pour un faisceau de photons de 15 MV [Mohan et al. \(1985\)](#). Les bords du champ d'irradiation sont délimités par une région à fort gradient de dose appelée *pénombre*. La pénombre est constituée de deux composantes, (i) la pénombre géométrique : correspond à la zone d'ombre en bordure du champ, représentant le caractère non ponctuel de la source d'électrons primaires ; (ii) la pénombre physique traduit l'effet de l'atténuation des photons par l'épaisseur de la mâchoire. Une bonne modélisation de cette composante permettra une bonne prise en compte des effets de la pénombre. Le mouvement curviligne des mâchoires est souvent utilisé, l'angle d'obliquité est calculé en fonction de la taille du champ d'irradiation [Lewis et al. \(1999\)](#), [Verhaegen & Seuntjens \(2003\)](#). Les mâchoires modélisées dans le cadre de ce travail sont en formes de boites de dimension $12 \times 7 \times 20 \text{ cm}^3$, en tungstène de masse volumique $\rho_W = 18.5 \text{ g.cm}^{-3}$ [fig.2.9](#).

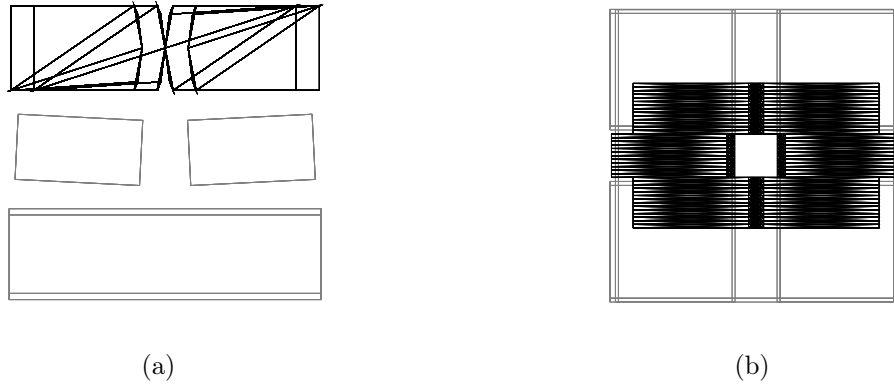


FIGURE 2.9: Visualisation [OpenGL Woo et al. \(1999\)](#) du collimateur secondaire ; mâchoires X/Y en gris, collimateur multi-lames en noir. (a) : Vue latérale, (b) : *beam eye view*.

- Le **collimateur multi-lames** est composé de plusieurs paires de lames, leur nombre définira la résolution du collimateur à l'iso-centre. La forme de la lame, son épaisseur ainsi que le type d'arrangement sont des paramètres étudiés pour améliorer et développer un design optimal [Hariri & Shahriari \(2010\)](#). Une bonne modélisation Monte Carlo du collimateur multi-lames se base d'une part sur la reproduction de sa géométrie complexe, tout en assurant la simplicité de la forme de chaque lame [De Vlaminck et al. \(1999\)](#). Le collimateur multi-lames utilisé dans les calculs que nous avons effectué, est formé par l'intersection de deux volumes, un parallélépipède rectangle de dimensions $8 \times 6 \times 0.5 \text{ cm}^3$ et un cylindre de rayon $r_c = 8 \text{ cm}$ et de hauteur $h_c = 0.5 \text{ cm}$ en tungstène [fig.2.9](#).

2.4.2 Méthodes de réduction de variance

2.4.2.1 Principe de base

Les simulations Monte Carlo de manière générale et particulièrement en radiothérapie sont très gourmandes en termes de temps d'exécution. Les techniques de simplification algorithmique appelées “méthode de réduction de variance” permettent d'alléger le calcul sans affecter la précision sur la grandeur calculée. Nous discuterons dans ce qui suit, quelques implémentations proposées pour les interactions des photons et des électrons. Des concepts similaires sont utilisés pour d'autres types de particules.

La précision sur le calcul de la valeur moyenne $\bar{f}$, estimateur de la grandeur f simulée, dépendra de l'incertitude statistique associée à la simulation de N particules primaires. Les fluctuations autour de la valeur réelle de la quantité f sont exprimées en fonction de la variance $\sigma_{\bar{f}}(N)$. La loi des grands nombres [Feller \(1971\)](#) précise que la variance tend vers 0 lorsque N le nombre des événements primaires simulés est très grand. En principe, il est impossible de calculer la valeur de $\sigma_{\bar{f}}(N)$ eq.2.68 puisqu'elle s'écrit en fonction de la variance σ de la loi statistique réelle de la grandeur f inconnue [Young \(2015\)](#) :

$$\sigma_{\bar{f}}^2 = \frac{\sigma^2}{N} \quad (2.68)$$

Un estimateur de la variance $\sigma_{\bar{f}}$ est noté $s(N)$:

$$s(N) = \sqrt{\frac{\overline{f^2}(N) - \bar{f}^2(N)}{N - 1}} \quad (2.69)$$

$\overline{f^2}(N)$ est la valeur moyenne de f^2 .

Les valeurs de $\overline{f^2}(N)$ et de $\bar{f}(N)$ sont calculées en moyennant le résultat obtenu pour chaque événement primaire, cette méthode est appelée *history by history* [Salvat et al. \(2006\)](#). L'équation 2.69 indique que la variance diminue lorsque le nombre d'événements N augmente, ce qui augmente également le temps d'exécution $T(N)$. Nous pouvons définir l'efficacité de calcul ϵ [Chetty et al. \(2007\)](#) :

$$\epsilon = \frac{1}{s^2(N)T(N)} \quad (2.70)$$

Pour un nombre N très grand, $s(N)$ est proportionnel à $1/\sqrt{N}$, donc $T(N)$ devient proportionnel à N . Nous pouvons donc conclure que l'efficacité du calcul est améliorée en choisissant l'une des trois possibilités suivantes : (i) réduire l'estimateur de variance $s(N)$, (ii) réduire le temps de calcul $T(N)$, ou bien (iii) combiner les deux à la fois.

2.4.2.2 Techniques de base

Parmi les techniques de réduction de variance standard, utilisées dans le cadre de la simulation des accélérateurs linéaires médicaux en mode photons nous citons :

- **Uniform bremsstrahlung splitting** : C'est une technique communément appliquée aux photons de freinage. Conformément au processus réel, lorsque l'électron passe à travers un milieu de haute densité, un photon est produit fig.2.10 (a). Un poids statistique unitaire $w = 1$ est affecté au photon créé, ce qui signifie qu'un photon réel est représenté par un photon simulé. Le *splitting* de l'interaction consiste à produire pour chaque interaction de freinage un nombre N_s de photons, chacun a un poids statistique $w = 1/N_s$. Cette technique est appelée uniforme puisque les photons sont produits de manière équiprobable indépendamment de l'énergie et de la direction. Cette méthode permet d'augmenter considérablement le rendement en photons et diminue en conséquence l'incertitude statistique sur le calcul de la dose dans un fantôme par exemple. Le temps nécessaire pour produire N_s photons est également réduit, puisqu'un électron unique suffira pour les produire au lieu de N_s électrons. L'énergie de l'électron primaire est réduite d'une quantité égale à l'énergie d'un seul photon choisi aléatoirement parmi l'ensemble des N_s photons, ce qui permet de conserver la forme du spectre total en énergie, nous pouvons donc dire que l'énergie est conservée en moyenne.

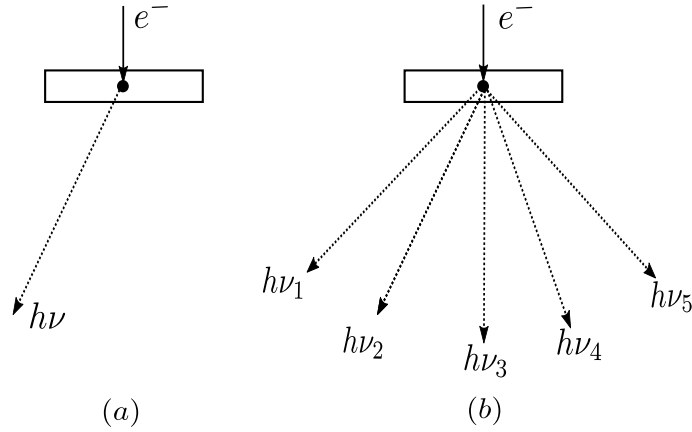


FIGURE 2.10: Représentation schématique de la simulation Monte Carlo de la production des photons de freinage avec et sans *bremsstrahlung splitting*. (a) : Simulation conforme au processus réel. (b) : Simulation avec *splitting*, production de cinq photons, chacun a un poids statistique $w = 1/5$.

- **Roulette russe** : cette approche est souvent utilisée simultanément avec le *splitting*. Pour une particule donnée, une probabilité de survie $p_s \ll 1$ est associée. Une variable aléatoire ζ uniformément distribuée sur $[0, 1]$ est échantillonnée. Si $\zeta < p_s$ la particule continue son parcours, sinon la particule est éliminée. Le poids statistique de la particule qui s'échappe de la roulette est incrémenté de la valeur $1/p_s$. La combinaison entre la *Roulette russe* et le *splitting*, améliore sensiblement l'efficacité de la simulation de la tête d'irradiation d'un accélérateur. Un photon de freinage créé dans la cible avec un poids statistique $1/N_s$, peut se diriger en direction du collimateur secondaire, une interaction *Compton* peut y avoir lieu, produisant par la suite un électron *Compton* de poids statistique $w = 1/N_s$. La plupart de ces électrons sont absorbés sans produire de rayonnements de freinage, leur transport alourdi inutilement la simulation, ce qui justifie l'élimination de tout électron avec une probabilité $1 - p_s$.

- **Interaction forcée** : Cette méthode montre un avantage clair lorsqu'il s'agit du calcul d'une grandeur telle que le dépôt de dose dans une géométrie voxélisée.

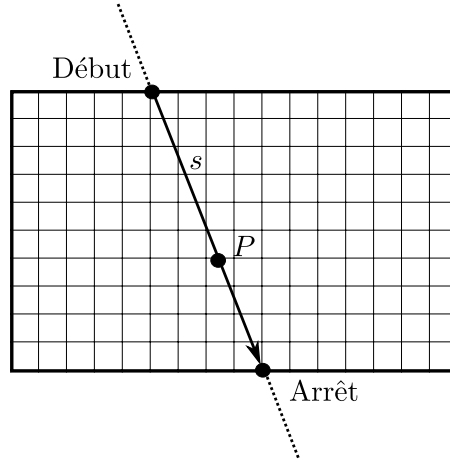


FIGURE 2.11: Interaction forcée d'un photon traversant un fantôme voxélisé.

L'exemple de la fig.2.11 illustre un photon qui traverse un milieu subdivisé en éléments de volume élémentaire, l'interaction a eu lieu au point P après le parcours s dans le milieu. Dans certains cas le parcours du photon peut dépasser la zone du volume d'intérêt, la poursuite de ces photons ne contribuant pas à la grandeur calculée induit une perte inutile du temps de calcul. Pour éviter ce problème, le point d'interaction P est forcé être entre les deux points *début* et *arrêt* fig.2.11.

Dans un milieu hétérogène, le maximum d'efficacité est atteint lorsque le nombre maximal de libre parcours moyen τ_m eq.2.71 est facilement calculé en fonction du pas de déplacement s_i et du coefficient d'interaction μ_i pour l'ensemble des voxels sur la trajectoire du photon. Le nombre de libre parcours moyen est échantillonné de la distribution exponentielle de l'équation 2.72 :

$$\tau_m = \sum_{début}^{arrêt} s_i \mu_i \quad (2.71)$$

$$p(\tau)d\tau = \frac{\exp(-\tau)d\tau}{\int_0^{\tau_m} \exp(-\tau)d\tau} \quad (2.72)$$

la valeur de τ est obtenue par la méthode de transformation, à partir d'une variable aléatoire uniforme $\zeta \in [0, 1]$, le nombre de libre parcours moyen τ appartiendra à l'intervalle $[0, \tau_m]$:

$$\tau = -\log_2(1 - \zeta(1 - \exp(-\tau_m))) \quad (2.73)$$

L'interaction forcée induit une diminution du poids statistique du photon en question d'une valeur égale à $\exp(-\tau_m)$.

La détermination de τ_m peut étaler le temps de calcul et diminuer l'efficacité de la technique.

2.4.2.3 Techniques avancées

Les techniques avancées de réduction de variance se basent en principe sur la combinaison de plusieurs techniques de base. Nous citons deux implémentations, développées principalement pour améliorer l'efficacité des simulations de la tête d'irradiation des accélérateurs linéaires en mode photons.

- ***Selective bremsstrahlung splitting*** : contrairement à la technique uniforme, fixant la valeur N_s du *splitting* pendant toute la simulation, la méthode *sélective* change la valeur de N_s en fonction de l'angle de diffusion ϕ , donc une relation $N_s(\phi)$ est définie. Il a été démontré que l'angle de diffusion du photon *bremsstrahlung* aura probablement une valeur proche de celle de l'électron freiné. La fonction $N_s(\phi)$ atteindra son maximum pour $\phi = 0^\circ$ et inversement son minimum pour $\phi = 180^\circ$. Les particules ayant un grand angle de diffusion se dirigent vers le collimateur primaire. La sélectivité du *splitting* en fonction de l'angle de diffusion, permet d'éviter la poursuite de particules qui vont être probablement absorbées par les parois du collimateur. Cette méthode induit une non-uniformité des poids statistiques w_i . Le poids de chaque particule créée est écrit en fonction de $N_s(\phi)$ sous la forme :

$$w(\phi) = \frac{1}{N_s(\phi)} \quad (2.74)$$

ϕ étant l'angle de diffusion de la particule initiale. Ceci signifie que les photons, passant à travers le même élément de volume, peuvent avoir différents poids statistiques.

Cette non-uniformité influencera la variance de la grandeur calculée dans le même élément de volume. La technique *selective splitting* améliore l'efficacité de calcul d'un facteur de deux à trois comparée à la méthode *uniform splitting* [Kawrakow et al. \(2004\)](#).

- ***Directional bremsstrahlung splitting*** : c'est un algorithme complexe visant l'amélioration de la méthode du *selective splitting*. Le nombre de *split* N_s est maintenu constant, à travers une analyse de l'orientation des photons produits pour chaque interaction, les photons se dirigeant vers le milieu d'intérêt continuent leur trajectoire et auront un poids statistique $w = 1/N_s$, les autres photons passent le test de la roulette russe, si la particule satisfait la condition une probabilité de survie $p_s = 1/N_s$ y est associée, sinon la particule est éliminée. Cette approche homogénéise le poids statistique des particules orientées directement vers le champ d'irradiation et améliore l'efficacité d'un facteur 8 comparée avec la technique *selective splitting* et d'un facteur 20 comparée à la technique *uniform splitting* [Kawrakow et al. \(2004\)](#).

2.4.3 Espace des phases

La précision d'une simulation Monte Carlo dépendra principalement de la précision avec laquelle la tête d'irradiation, de l'accélérateur linéaire médical, est modélisée.

La position, la direction et l'énergie, représentent les principales variables décrivant l'état des particules passant par un plan perpendiculaire à la direction du faisceau de l'accélérateur, connu sous le nom *espace des phases*. Pour générer ces données, la connaissance détaillée de la géométrie et de la composition de chaque élément de la tête d'irradiation est indispensable. De plus, le calcul d'espaces des phases conformes aux normes fixées par la commission de l'AIEA nécessite une maîtrise des méthodes de calcul Monte Carlo pour générer et valider ce genre de données basées sur la simulation [Capote et al. \(2006\)](#).

2.4.3.1 Format de l'Agence Internationale de l'Énergie Atomique

L'espace des phases est une collection représentative de pseudo-particules issues d'un accélérateur de particules à usage médical. Les propriétés de chaque particule, passant à travers le plan virtuel de l'espace des phases, sont collectées. En général ce plan est placé sous la partie indépendante de la tête d'irradiation de l'accélérateur [Capote et al. \(2006\)](#), ou bien en dessous du collimateur multi-lames [fig.2.5](#). La position, la direction, l'énergie et le poids statistique sont des variables enregistrées pour chaque particule dans un fichier binaire. Un format standard est recommandé pour décrire ces fichiers de données. L'espace des phases est représenté par un fichier entête spécifiant le nombre de chaque type de particules, le code Monte Carlo utilisé pour la génération, ainsi que d'autres informations. Un deuxième fichier (fichier principal) contient les données brutes de chaque particule enregistrée [tab.2.1](#).

TABLE 2.1: Variables enregistrées sur un fichier d'espace des phases suivant la norme de l'AIEA.

Variable	Signification	Type
x	Position sur l'axe (OX) [cm]	Réel*4
y	Position sur l'axe (OY) [cm]	Réel*4
z	Position sur l'axe (OZ) [cm]	Réel*4
u	Projection du vecteur de direction sur (OX)	Réel*4
v	Projection du vecteur de direction sur (OY)	Réel*4
w	Projection du vecteur de direction sur (OZ)	Réel*4
E	Énergie de la particule [MeV]	Réel*4
Statistical_Weight	Poid statistique	Réel*4
Particle_type	Type de la particule	Entier*2
Sign_of_W	Orientation du faisceau selon l'axe (OZ)	Booléen
Is_new_history	La particule est-elle primaire?	Booléen
Integer_extra	Variable optionnelle	Entier*4
Float_extra	Variable optionnelle	Réel*4

Une base de données publique comportant des fichiers d'espaces des phases a été mise au service des utilisateurs par l'[AIEA](#). Cette initiative a été lancée dans le cadre d'un projet visant à collecter et à partager des fichiers d'espaces des phases de plusieurs machines de traitement et différentes qualités de faisceaux électrons/photons, pré-calculés par la méthode de Monte Carlo et validés par une commission de spécialistes.

2.4.3.2 Nombre de particules par unité de surface

Le nombre de particules par unité de surface est considéré le critère d'évaluation le plus important. Une fluence de 10^4 particules par unité de surface induit une incertitude statistique de l'ordre de 1%. La fluence minimale acceptée pour un espace des phases est approximativement 2500 particule/mm² à l'isocentre.

Il a été démontré que l'utilisation des méthodes de réduction de variance dans la génération des espaces des phases, utilisés par la suite pour calculer le dépôt de dose, ne réduira jamais la variance en dessous d'une valeur limite appelée "variance latente", caractéristique intrinsèque à chaque espace des phases [Sempau et al. \(2001\)](#).

2.4.4 Modèle de sources virtuelles

L'approche du modèle de sources virtuelles permet d'améliorer sensiblement l'efficacité de la simulation d'un linac médical, à travers une reconstruction du faisceau de particules. L'un des premiers modèles développés, regroupe les photons du faisceau en deux catégories : (i) une source primaire qui représente les photons issus de la cible ; (ii) une source secondaire de photons diffusés. Chacune des deux sources est décrite par une distribution *gaussienne*. Les spectres énergétiques sont décrits par un modèle mathématique dont les paramètres sont dérivés à partir de mesures expérimentales [Fippel et al. \(2003\)](#).

Le concept de modèle à sources multiples a été adopté par *Fix et al.* lorsque chacune des composantes de la tête d'irradiation d'un accélérateur est approximée par une source virtuelle de rayonnements [Fix et al. \(2001\)](#). L'élaboration d'un modèle de sources virtuelles devrait prendre en considération les corrélations qui existent entre les différentes variables décrivant une particule.

2.5 Conclusion

Les méthodes Monte Carlo ont été développées au début pour le calcul d'intégrale complexe, l'idée consiste à représenter l'intégrale sous forme d'une espérance mathématique calculée après le tirage de n valeurs aléatoires. Le progrès scientifique en informatique et l'apparition des calculateurs durant la deuxième guerre mondiale ont facilité l'utilisation de cette approche à caractère aléatoire, très adaptée pour résoudre le problème de la diffusion neutronique dans le cadre du projet de fabrication de la première bombe atomique.

Quelques années plus tard, le champ d'application de la méthode Monte Carlo s'est élargi pour toucher plusieurs domaines. En radiothérapie externe, la modélisation des accélérateurs linéaires représente l'exemple concret de cette adaptation. Les premières investigations étaient focalisées sur la détermination du spectre de freinage, par la suite plusieurs aspects du faisceau de particules ont été étudiés. Les simulations Monte Carlo sont limitées par la lenteur des calculs due à la complexité à la fois du phénomène physique implémenté et la géométrie simulée.

Plusieurs approches ont été publiées pour améliorer l'efficacité à travers l'utilisation des espaces des phases, des méthodes de réduction de variance, ou bien des modèles de sources virtuelles. Cependant, l'élaboration de nouvelles solutions visant l'accélération du calcul sans perte de précision, point fort des méthodes Monte Carlo, reste toujours un champ actif de recherche et développement.

Chapitre 3

Notions de base sur le code de calcul Geant4

3.1 Introduction

L'élaboration d'un code Monte Carlo modélisant l'interaction rayonnement-matière, rapide et suffisamment précis, a toujours représenté un défi. La demande croissante à grande échelle, d'outils de simulation adaptés à différentes disciplines, physique des particules, astrophysique, physique médicale ..., ainsi que la disponibilité de puissantes ressources de calculs, sont des facteurs favorisant le développement et l'amélioration des codes de calcul Monte Carlo existants.

Geant4¹, **Geometry and tracking**, est un code Monte Carlo pour la simulation d'interactions rayonnement-matière sous licence libre, basé sur la programmation *orientée objet* et écrit en C^{++} [Rumbaugh et al. \(1991\)](#). C'est une boîte à outils fournissant les éléments de base pour simuler aussi bien un système basique et simple, qu'un système complexe de détecteurs utilisé dans l'une des expériences du grand collisionneur d'hadrons (**LHC**)².

L'architecture de cet outil de simulation facilite à l'utilisateur l'incorporation des différents modules **Geant4** dans son code de base. Cet aspect donne une meilleure flexibilité et accessibilité à tous les niveaux, construction de la géométrie simulée ; processus physique et méthodes de calcul ; collecte d'informations ; optimisation et amélioration ; production et analyse des résultats.

Dans ce qui suit, nous présentons globalement la structure et les concepts de base liés au code de calcul **Geant4**. Nous discutons également les paramètres et les méthodes pour améliorer l'efficacité d'une simulation **Geant4**.

1. <https://geant4.web.cern.ch/>

2. <https://home.cern/fr/science/accelerators/large-hadron-collider>

3.2 Aperçu historique

Historiquement, le développement du code **Geant4** remonte à l'année 1993 durant laquelle le [CERN](https://home.cern/fr)³ et le [KEK](https://www.kek.jp/en/About/)⁴ ont commencé indépendamment des recherches pour mettre à jour le code existant à l'époque **Geant3** écrit en **FORTRAN** [Agostinelli et al. \(2003\)](http://committees.web.cern.ch/Committees/LHCC/Welcome.html). Deux propositions pour implémenter un code de simulation basé sur les notions de la programmation modulaire *orientée objet* écrit en langage **C++** ont été soumis au CERN, *Detector Research and Development Committee* ([DRDC](http://committees.web.cern.ch/Committees/LHCC/Welcome.html)⁵). Le résultat de ce projet était la collaboration [RD44](http://committees.web.cern.ch/Committees/LHCC/Welcome.html) regroupant les efforts d'une centaine de chercheurs et d'ingénieurs faisant partie de 10 expériences en Europe, Russie, Japon, Canada et États-Unis.

Le comité de *Recherche et développement* (DRDC) a été dissout en décembre 1998, avec la sortie de la première version officielle du code. Par la suite, la [collaboration Geant4](http://committees.web.cern.ch/Committees/LHCC/Welcome.html) a été établie pour continuer la maintenance et l'amélioration du code et fournir également le service assistance aux utilisateurs.

3.3 Structure globale

Geant4 est constitué de 17 catégories d'objets organisés dans le diagramme de la figure [3.1](#), chaque catégorie peut contenir plusieurs classes **C++**. Les dépendances entre les différentes catégories sont unidirectionnelles. Les catégories d'un niveau sont directement ou indirectement utilisées par les catégories des niveaux supérieurs. En bas la catégorie **Global** inclue le système d'unité utilisé pour exprimer toute grandeur mesurable, les constantes, la manipulation de nombres aléatoires. Cette catégorie contient également une interface de communication avec les bibliothèques externes telle que *Computing Library for High Energy Physics* ([CLHEP](#)). **Material**, **Particle**, **Graphical_Reps** et **Geometry** sont des catégories pour la définition de la géométrie du système simulé, la navigation et le repérage des particules dans les différents volumes. **Intercoms** représente l'interface de communication entre les différents modules.

La catégorie **Tracks** indique l'état de la particule à un instant donné, durant son transport dans le système modélisé et contient la classe **C++ G4Track** retournant des informations sur la trace de la particule, il s'agit de la position, l'énergie cinétique de la particule, le volume dans lequel elle se trouve, le pas d'avancement élémentaire **step** utilisé par la catégorie **Processes** contenant l'implémentation et la définition des modèles physiques pris en considération. Les variables fournies par la classe **G4Track** sont mises à jours par la classe **G4Step**. Cette dernière informe sur la variation des grandeurs décrivant la particule entre les deux points délimitant le **step** d'avancement. La classe **G4Step** permet principalement de déterminer le dépôt d'énergie et le temps de vol de la particule durant le **step**.

3. <https://home.cern/fr>

4. <https://www.kek.jp/en/About/>

5. <http://committees.web.cern.ch/Committees/LHCC/Welcome.html>

La catégorie **Event** est l'unité structurale d'une simulation **Geant4**, permettant d'accéder aux informations concernant une particule primaire. Le calcul d'une grandeur à l'issue du traitement d'un événement (particule primaire) se fait optionnellement par l'intermédiaire d'un objet de la catégorie **Digits** constitué d'une collection d'objets de la catégorie **Hits**. Les **hits** sont comptabilisés après chaque **step** dans le volume du détecteur simulé.

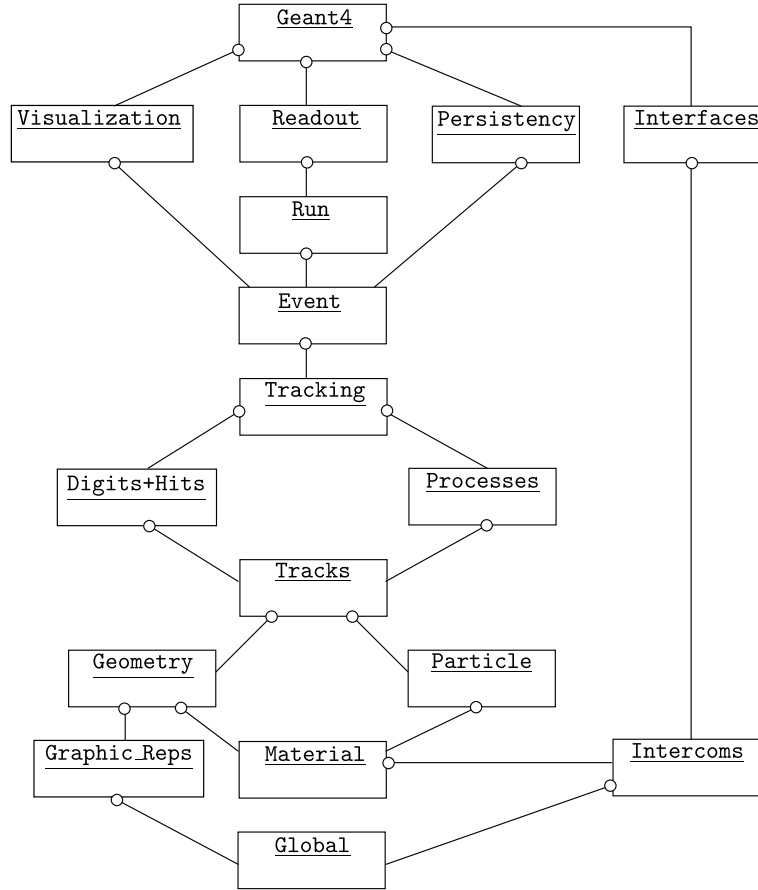


FIGURE 3.1: Diagramme des catégories de classes contenues dans le code **Geant4**.

La géométrie du détecteur est souvent complexe et peut contenir plusieurs cellules adjacentes ou/et superposées. Dans cette situation, la décomposition du détecteur en cellules alourdit sensiblement la simulation et réduit considérablement les performances du calcul. La catégorie **ReadOut** propose une solution à ce problème, l'idée consiste redéfinir la forme de la géométrie complexe dans "un univers parallèle" appelé *Parallel world*, appliquer la décomposition en cellules et l'attacher par la suite au volume détecteur correspondant au système simulé. Cette méthode permet de déterminer de manière efficace l'emplacement des **hits** dans les différentes couches du détecteur durant la simulation.

Une collection d'événements constitue le **Run**, de manière similaire à une expérience réelle, durant le **Run** l'utilisateur ne peut pas changer des paramètres telle que la géométrie ou les processus physiques simulés. Cependant, une simulation peut être décomposée en plusieurs **Runs** pour étudier l'effet d'un ou de paramètres multiples.

L'accès, la manipulation des différentes catégories, ainsi que la connexion avec les modules externes sont des fonctionnalités assurées par la catégorie **Interfaces**.

Dans les sections qui suivent, nous décrivons les catégories (classes C^{++}) généralement mises en œuvre par l'utilisateur pour élaborer un code de simulation basé sur le package **Geant4**. il s'agit donc de : (i) la définition de la source de particules primaires, (ii) la modélisation de la géométrie du système simulé, (iii) la déclaration des processus physiques d'intérêt et (iv) l'implémentation de la méthode de *scoring* pour calculer la grandeur à déterminer.

3.3.1 Génération des particules primaires

La simulation de l'interaction rayonnement-matière nécessite une description précise des propriétés de la source de rayonnements primaires, représentées dans un code de simulation par le générateur d'événements primaires faisant partie de la catégorie **event**. Le code utilisateur devrait comporter une classe dérivée de la classe virtuelle de base **G4VUserPrimaryGeneratorAction**, dans laquelle le type des particules, leur direction et leur énergie sont définis.

Lorsqu'il s'agit de source de rayonnement de caractéristiques simples, une classe appelée **G4GeneralParticleSource** permet de définir facilement : la distribution spatiale (ponctuelle, planaire, volumique, ...); la distribution angulaire d'émission (isotrope, angle solide, ...); l'énergie des particules si cette source est mono-énergétique, ou bien la distribution statistique si le spectre énergétique est connu. La superposition de plusieurs sources de rayonnements est également possible à travers cette classe.

La définition d'une source à caractère complexe se fait par l'intermédiaire de la classe **G4ParticleGun**, l'utilisateur dans ce cas devrait élaborer un code pour générer les propriétés de la source, à savoir la distribution spatiale, le spectre en énergie, ainsi que la distribution de l'angle d'émission.

3.3.2 Géométrie et construction de détecteurs

La catégorie **Geometry** donne la possibilité de décrire la structure du système simulé. **Geant4** contient des versions améliorées de certains modules déjà implémentés dans d'autres codes de calcul Monte Carlo. Particulièrement **Geant4** est capable de lire des géométries générées au préalable par une conception assistée par ordinateur (**CAO**), pour décrire une structure complexe difficile à modéliser à partir des formes géométriques usuelles [Poole et al. \(2012\)](#).

L'instanciation des composantes dans **Geant4** se base sur le concept de volume *logique* et volume *physique*. Un volume *logique* représente un élément de la géométrie simulée, pouvant comporter récursivement d'autres volumes à l'intérieur. Le matériau de la composante et la propriété de détectabilité si le volume fait partie d'un détecteur, sont des attributs assignés au volume logique pour compléter sa définition. Un volume *physique* permet de positionner le volume *logique* dans l'espace par

rapport à l'origine du volume dans lequel il est placé (*mother volume*). Le repérage des composantes de la géométrie modélisée dans **Geant4** est référencé par un arbre hiérarchique.

La forme du volume logique est spécifiée par une entité appelée **solid**. Toutes les formes usuelles sont présentes *boite*, *sphère*, etc. Les formes complexes sont définies par des équations de degré supérieur ou égal à deux. Une forme géométrique est obtenue aussi par une combinaison d'opérations logiques appliquées à deux ou plusieurs volumes. L'opération peut être l'union, l'intersection, ou la soustraction de volumes.

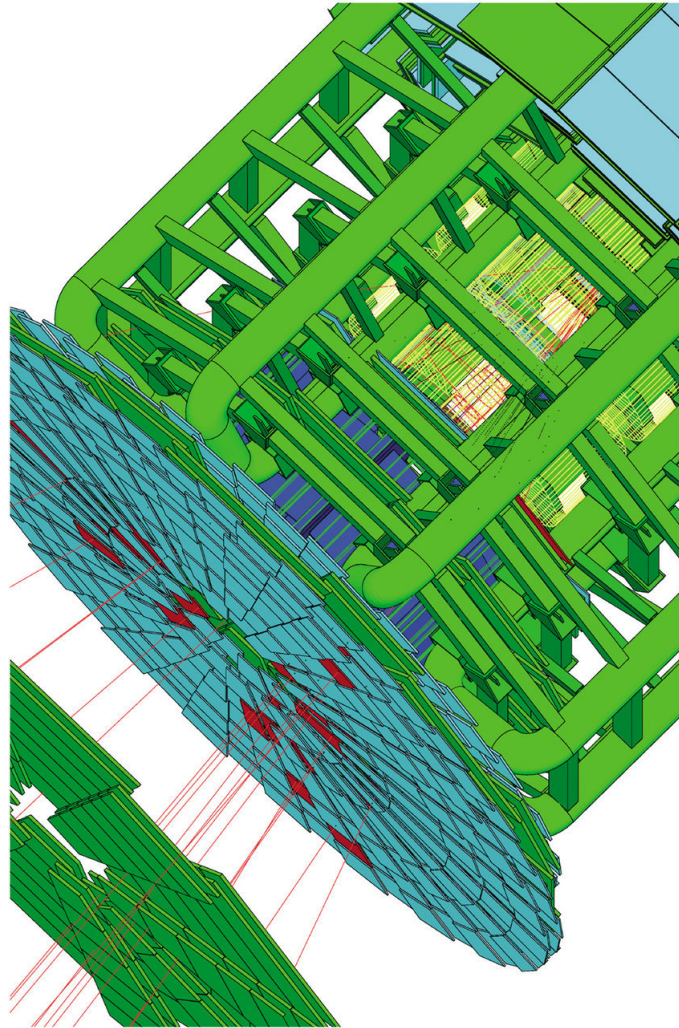


FIGURE 3.2: Visualisation d'un détecteur complexe avec le module **DAWNFILE** utilisé dans **Geant4** [Agostinelli et al. \(2003\)](#).

La catégorie **Visualisation** permet de visualiser la géométrie modélisée et de produire des fichiers sortie de haute qualité. Cette interface utilise des systèmes graphiques indépendants. La figure 3.2 montre une visualisation d'un détecteur complexe, par le module **DAWNFILE**⁶.

La déclaration de la géométrie se fait par l'instanciation d'une classe **C++**, dérivée

6. **DAWNFILE** : **D**rawer for **A**cademic **W**riti**N**gs est un processeur d'images vectorielles 3D.

de la classe mère `G4VUserDetectorConstruction`, dans laquelle la géométrie, les matériaux utilisés et les attributs de la visualisation sont définis.

3.3.3 Processus physiques

`Geant4` permet de simuler une variété de processus physiques regroupés en sept catégories : *electromagnetic*, *hadronic*, *decay*, *optical*, *photonuclear*, *parameterization* et *transportation* [Geant4 Collaboration \(2014\)](#). Dans le cadre de cette thèse, nous allons nous concentrer sur les processus *electromagnetic* et *transportation* nécessaires et suffisants pour la simulation d'un *linac* médical.

Les processus physiques d'intérêt ainsi que les particules concernées sont déclarés dans une classe dérivée de `G4VUserPhysicsList`.

3.3.3.1 Processus de Transportation

Ce processus gère la propagation des particules dans les différents volumes en cas de présence ou d'absence de champs électromagnétique. À travers ce processus `Geant4` calcule la longueur du pas de déplacement élémentaire *step* de la particule en fonction du milieu et des contraintes géométriques, ce processus permet aussi de détecter le bord du volume dans lequel la particule est transportée. Le processus de transportation est appliqué à toutes les particules définies par l'utilisateur.

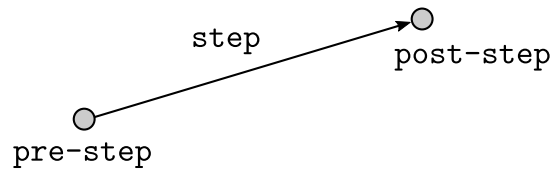


FIGURE 3.3: Le pas d'avancement (*step*) d'une particule en mouvement entre les deux points *pre-step* et *post-step*.

Le *step* dans `Geant4` est déterminé par deux points *Pre-Step point* et *Post-Step point* fig.3.3, les informations les plus importantes associées à l'objet *step* concernent l'énergie cédée entre les deux points, le temps de vol, les particules secondaires créées, la longueur du *step* ...

3.3.3.2 Processus électromagnétiques

Les processus *électromagnétiques* simulent les interactions des photons, leptons, hadrons et ions. Nous citons trois parmi les modèles disponibles et que nous pouvons choisir en fonction de la gamme d'énergie des particules simulées : *Low-energy*, *Standard* et *Penelope* [Hall \(2011\)](#), [Salvat et al. \(2008\)](#).

Les processus physiques sous **Geant4** sont dérivés de la classe de base **G4VProcess**. Chaque processus simule au moins l'une des actions suivantes :

1. continue (**AlongStep**) : perte d'énergie continue ;
2. discret (**PostStep**) : interaction et/ou désintégration durant le vol de la particule ;
3. au repos (**AtRest**) : désintégration au repos, annihilation d'un positron au repos, capture nucléaire au repos.

Deux méthodes sont définies pour chacune des actions précédentes :

1. **GetPhysicalInteractionLength** : calcule la longueur du *step* et l'emplacement de l'interaction, cette fonction permet aussi de limiter la valeur du *step* ;
2. **DoIt** : détermine l'état de la particule après interaction (calcul de la direction, génération des particules secondaires ...) [Geant4 Collaboration \(2014\)](#).

Cette interface permet à l'utilisateur une bonne gestion des processus physiques et donne aussi la possibilité de modifier ou d'améliorer facilement les modèles physiques existants.

3.3.3.3 Source de données de sections efficaces

La précision d'un code Monte Carlo est fortement influencée par la précision des données de section efficace utilisées. Ces données sont mises à jour et incluses dans des bibliothèques électroniques dédiées : XCOM du *National Institute of Standards and Technology* ([NIST](#)) [Berger & Hubbell \(1987\)](#) ; *Evaluated Photon Data library* ([EPDL97](#)) du *Lawrence Livermore National Laboratory* ([LLNL](#)) en collaboration avec le NIST [Cullen et al. \(1997\)](#) ; PHOTX incorporées dans le code EGS4 [Sakamoto \(1993\)](#).

Pour la gamme d'énergie utilisée en radiothérapie XCOM et EPDL97 sont considérées les mieux adaptées. La bibliothèque XCOM contient les sections efficaces et les coefficients d'atténuation de plusieurs matériaux pour une gamme énergétique de 1 keV jusqu'à 100 GeV. La bibliothèque EPDL97 fournit des valeurs à partir de 1 eV, mais avec une incertitude élevée pour les faibles énergies inférieures à 1 keV [Cullen et al. \(1997\)](#).

La bibliothèque *Evaluated Electron Data Libray* ([EEDL](#)) contient les sections efficaces d'interaction des électrons. Le code **Geant4** utilise les données de EEDL pour le calcul en basse énergie. Les références recommandées pour le pouvoir d'arrêt par collision S_{col} , sont celles du rapport de l'ICRU N° 37. La bibliothèque ESTAR disponible en ligne fournit également les pouvoirs d'arrêt sous forme tabulée pour 72 types de matériaux [Berger \(1992\)](#).

Une bibliothèque dédiée pour la relaxation atomique, *Evaluated Atomic Data Library* ([EADL](#)), peut être utilisée pour l'estimation de la probabilité des effets de la fluorescence et Auger [Perkins et al. \(1991\)](#). La base de données EADL est utilisée dans les codes de calcul **Geant4** et **EGSnrc**.

3.3.4 *Tracking*

Dans **Geant4**, une particule en mouvement dans un détecteur est traitée comme une particule classique, c'est un objet ponctuel avec une position (x, y, z) , une direction (u, v, w) et une énergie E bien définies. Cette approche paraît raisonnable puisqu'une particule est en réalité observée par sa trace microscopique dans un détecteur.

Le *tracking* est une procédure complexe qui consiste à calculer et mettre à jour toutes les variables décrivant la particule et pouvant changer au cours du *step* et après chaque interaction. Ces changements appliqués à ces variables sont effectués par la classe **G4SteppingManager**. Certains processus physiques comme l'ionisation et la production de rayonnement de freinage sont simulés implicitement, ils sont considérés à la fois continus et discrets. La partie continue du processus simule les pertes d'énergie continues de la particule entre les deux points **pre-step** et **post-step** fig.3.3. Les interactions des particules secondaires créées sont calculées explicitement par des processus discrets. Le libre parcours moyen est calculé pour ce type d'interactions en fonction de la section efficace macroscopique de la particule pour le milieu considéré.

Brièvement, l'algorithme simplifié de l'opération *tracking* suit les étapes suivantes [Poon \(2004\)](#) :

1. Déterminer la longueur du *step*.
2. Calculer la distance à la prochaine bordure du volume dans lequel la particule est en mouvement.
 - Si la valeur du *step* est inférieure à cette distance, le *step* est sélectionné.
 - Sinon la longueur du *step* est recalculé.
3. Les processus continus sont appliqués. L'énergie de la particule est mise à jour lorsque tous les processus sont terminés.
4. Toutes les propriétés de la particule, telles que l'énergie cinétique et la position définies dans la classe **G4Track** à travers l'objet *track*, sont mises à jour. Les particules secondaires créées après chaque interaction sont empilées.
5. Vérification de l'énergie cinétique de la particule. Le processus **atRest** est appliqué si l'énergie est mise à zéro durant cette interaction.
6. Les processus discrets sont appliqués. Toutes les informations de l'objet *track* sont mises à jour, les particules secondaires sont empilées.
7. Vérification de l'énergie cinétique de la particule.
8. La distance entre la particule et la bordure du volume est recalculée.
9. Appelle et exécution des méthodes définies par l'utilisateur dans la classe dérivée de la classe de base **G4UserSteppingAction**.
10. Terminaison du *step* en cours.

3.3.5 *Scoring*

Les informations d'intérêt sont enregistrées après interaction des particules avec les régions possédant l'attribut de détection. Un volume faisant partie d'un détecteur,

acquiert ce caractère de sensibilité en l’attachant à une classe dérivée de la classe **Geant4** de base **G4VSensitiveDetector**. Les grandeurs calculées et la méthode de calcul sont codées par l’utilisateur à travers la fonction **ProcessHits**. Cette dernière méthode est appelée par le noyau de **Geant4** chaque fois qu’une particule traverse le volume détecteur instancié.

Le dépôt d’énergie au cours du *step*, l’énergie de la particule traversant le volume sensible, sa position et sa direction sont des informations qui peuvent être sauvegardées ou utilisées pour le calcul d’une grandeur durant la simulation. Les informations géométriques, telles que les coordonnées de la particule par rapport à l’un des volumes de la hiérarchie, sont accessibles à partir d’un objet de la classe **G4TouchableHistory**.

En cas d’utilisation d’une géométrie voxélisée, la détermination des indices du voxel où l’énergie d’une particule est déposée par exemple, se base sur le concept de **ReadOutGeometry**, c’est une grille virtuelle définie dans un espace parallèle (*parallel world*), elle est placée dans la même position et épouse la même forme que le volume voxélisé. Les particules sont transportées à travers le volume réel non voxélisé, cependant, le détecteur associé utilise la géométrie virtuelle durant le *scoring* pour remonter aux informations concernant la navigation des particules.

3.4 Interaction des photons

3.4.1 Effet photoélectrique

La formulation théorique de la section efficace d’absorption par effet photo-électrique σ_A est très complexe. La détermination de σ_A est basée sur la proportionnalité suivante :

$$\sigma_A \propto \frac{Z^m}{(h\nu)^n} \quad (3.1)$$

$h\nu$ est l’énergie du photon incident, Z le numéro atomique de l’élément traversé. $m \in [4, 4.8]$ et $n \in [1, 3]$ sont des nombres dont les valeurs varient en fonction de l’énergie du photon.

Le processus photo-électrique du module *Standard* implémenté dans **Geant4**, fait appel à la formule paramétrique, proposée par *Biggs et Lighthill* [Biggs & Lighthill \(1988\)](#) :

$$\sigma_A = \sum_{i=1}^4 \frac{a_i(Z, h\nu)}{(h\nu)^i} \quad (3.2)$$

a_i sont les paramètres d’ajustements en fonction de l’énergie.

Les données de section efficace sont prises de la bibliothèque EPDL97, mais malgré la prédominance de l’effet photo-électrique dans la gamme de basse énergie, les incertitudes pour cette base de donnée sont très élevées [tab.3.1](#).

Les niveaux énergétiques des différentes couches dépendent du numéro atomique de l’élément. En cas d’un matériau composé de plusieurs atomes, la probabilité que

TABLE 3.1: Intervalle d’incertitude sur la section efficace de l’effet photo-électrique de la bibliothèque EPDL97, pour les éléments gazeux et solides [Cullen et al. \(1997\)](#), [Poon & Verhaegen \(2005\)](#).

Gamme d’énergie	Solide	Gaz
10–100 eV	1000%	20%
100–500 eV	100%–200%	10%–20%
0.5–1 keV	10%–20%	5%
1–5 keV	5%	5%
5–100 keV	2%	2%
0.1–10 MeV	1%–2%	1%–2%

l’effet photo-électrique ait lieu est échantillonnée de la distribution suivante :

$$P(Z_i, h\nu) = \frac{n_i \cdot \sigma_i(Z_i, h\nu)}{\sum_i [n_i \cdot \sigma_i(Z_i, h\nu)]} \quad (3.3)$$

n_i est le nombre d’atomes de l’élément i .

La couche énergétique est choisie pour satisfaire la condition $h\nu > B_{shell}$, $h\nu$ est l’énergie du photon ; B_{shell} est l’énergie de liaison d’un électron situé sur la couche i . L’énergie cinétique du photo-électron s’écrira donc sous la forme :

$$T_{e-} = h\nu - B_{shell}(Z_i) \quad (3.4)$$

Selon les packages de simulation d’interactions électromagnétiques *Standard*, *Low-energy* et *Penelope* implémentés dans **Geant4**, L’angle polaire de diffusion du photo-électron est échantillonnée de la distribution de *Sauter-Garvila* [Botto & Gavrila \(1982\)](#). Cette distribution est valable pour les photons énergétiques, provoquant des ionisations au niveau de la couche K .

L’atome ionisé devient excité à cause du gap laissé par l’électron éjecté. Le modèle de l’effet photo-électrique du package *Standard* ne simule pas la relaxation de l’atome, par contre les modèles *Low-energy* et *Penelope*, simulent la fluorescence pour des éléments de nombre atomique $Z > 5$. Par défaut l’effet *Auger* est désactivé dans la simulation.

3.4.2 Diffusion Compton

La section efficace de l’effet *Compton* fig.3.4 du package *standard* est calculée à partir de la formule proposée par *Urbán* [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#) :

$$\sigma(Z, h\nu) = \left[P_1(Z) \frac{\log_{10}(1 + 2X)}{X} + \frac{P_2(X) + P_3(Z)X + P_4(Z)X^4}{1 + aX + bX^2 + cX^3} \right] \quad (3.5)$$

Z : numéro atomique de l’élément.

$h\nu$: énergie du photon incident.

$X = h\nu/m_e c^2$; m_e : masse au repos de l’électron ;

$P_i(Z) = Z(d_i + e_i Z + f_i Z^2)$.

$a, b, c, d_i, e_i, f_i, i = \{1, 2, 3, 4\}$: paramètres d'ajustement.

La détermination des paramètres du modèle est effectuée à travers un ajustement, avec la fonction 3.5, appliqué à 511 points de mesure de section efficace. L'incertitude sur la section efficace est de l'ordre de 10% pour des énergies allant de 10 à 20 keV et de 5 à 6% pour des énergies supérieures à 20 keV [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#).

Les données de la bibliothèque EPDL97 sont basées sur la section efficace différentielle de *Klein-Nishina* utilisée dans le modèle *low energy* :

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \pi r_e^2 \frac{m_e c^2}{h\nu} Z \left[\frac{1}{\epsilon} + \epsilon \right] \left[1 - \frac{\epsilon \sin^2 \theta}{1 + \epsilon^2} \right] \quad (3.6)$$

$$\epsilon = \frac{h\nu'}{h\nu} = \frac{1}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (3.7)$$

$h\nu$ et $h\nu'$ sont respectivement les énergies du photon incident et du photon diffusé. Nous pouvons noter que la quantité ϵ eq.3.7 appartient à l'intervalle $[1/(1 + 2h\nu), 1]$, nous allons prendre dans ce qui suit $\epsilon_0 = 1/(1 + 2h\nu)$.

r_e et m_e sont la masse au repos et le rayon de l'électron.

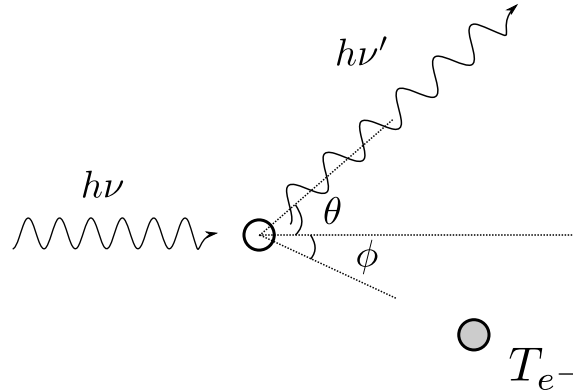


FIGURE 3.4: diffusion d'un électron par effet Compton.

Pour échantillonner la proportion d'énergie emportée par le photon diffusé notée ϵ , l'équation.3.6 est factorisée sous la forme suivante :

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} \simeq \left[\frac{1}{\epsilon} + \epsilon \right] \left[1 - \frac{\epsilon \sin^2 \theta}{1 + \epsilon^2} \right] = f(\epsilon).g(\epsilon) \quad (3.8)$$

$$f(\epsilon).g(\epsilon) = [\alpha_1 f_1(\epsilon) + \alpha_2 f_2(\epsilon)].g(\epsilon) \quad (3.9)$$

$$\alpha_1 = \log_2 \left(\frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad , \quad f_1(\epsilon) = \frac{1}{\alpha_1 \epsilon} \quad (3.10)$$

$$\alpha_2 = \frac{1 - \epsilon_0^2}{2} \quad , \quad f_2(\epsilon) = \frac{\epsilon}{\alpha_2}$$

$$g(\epsilon) = \left[1 - \frac{\epsilon \sin^2 \theta}{1 + \epsilon^2} \right] \quad (3.11)$$

$f_1(\epsilon)$, $f_2(\epsilon)$ sont des fonctions de densité de probabilité définies sur l'intervalle $[\epsilon_0, 1]$. L'algorithme basé sur la méthode de rejet est appliqué pour échantillonner ϵ en 4 étapes, prenant l'expression $g(\epsilon)$ eq.3.11, ($0 \leq g(\epsilon) \leq 1$) comme fonction de rejet :

Au début un triplet de variables aléatoires (r_a, r_b, r_c) uniformément distribuées sur $[0, 1]^3$ est initialisé,

1. Choisir l'une des deux fonctions $f_1(\epsilon)$ ou $f_2(\epsilon)$:
 - si $r_a < \alpha_1/(\alpha_1 + \alpha_2)$ choisir $f_1(\epsilon)$
 - sinon choisir $f_2(\epsilon)$
2. échantillonner ϵ en fonction de la distribution sélectionnée :
 - $f_1 : \epsilon = \exp(-\alpha_1 r_b)$
 - $f_2 : \epsilon^2 = \epsilon_0^2 + (1 - \epsilon_0^2)r_b$
3. calculer $\sin^2 \theta = t(2 - t)$;
 $t = 1 - \cos \theta = m_e c^2 (1 - \epsilon) / (h\nu \epsilon)$
4. Accepter ou rejeter ϵ en fonction de r_c
 - accepter si : $r_c \leq g(\epsilon)$
 - sinon retourner à l'étape 1.

Une fois l'énergie du photon diffusé $h\nu'$ est calculée, l'angle de diffusion θ est déduit de l'équation suivante :

$$h\nu' = h\nu \frac{m_e c^2}{m_e c^2 + h\nu(1 - \cos \theta)} \quad (3.12)$$

L'énergie cinétique T_{e-} de l'électron et son angle de diffusion, sont déterminés à partir des lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement :

$$T_{e-} = h\nu - h\nu' \quad (3.13)$$

$$\vec{P}_{e-} = \vec{P}_{h\nu} - \vec{P}_{h\nu'} \quad (3.14)$$

Le modèle d'interactions électromagnétiques *Penelope* tient compte de l'énergie de liaison de l'électron B_{shell} , donc l'équation 3.13 s'écrit sous la forme :

$$T_{e-} = h\nu - h\nu' - B_{shell} \quad (3.15)$$

L'angle de diffusion ϕ de l'électron arraché est calculé en fonction de l'énergie du photon incident $h\nu$, de l'énergie $h\nu'$ et de l'angle θ de diffusion du photon *Compton* fig.3.4 :

$$\cos \phi = \frac{h\nu - h\nu' \cos \theta}{\sqrt{(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h\nu.h\nu' \cos \theta}} \quad (3.16)$$

3.4.3 Matérialisation

La section efficace totale de production de paire électron-positron est calculée avec la formule développée par *Urbán Geant4 Collaboration et al. (2016)* :

$$\sigma(Z, h\nu) = Z(Z + 1) \left[F_1(X) + F_2(X)Z + \frac{1}{Z}F_3(X) \right] \quad (3.17)$$

$h\nu$ est l'énergie du photon incident allant de 1.5 MeV jusqu'à 100 GeV.

$F_{\{1,2,3\}}(X)$ sont des fonctions polynomiales du cinquième ordre et $X = \log_2(h\nu/m_e c^2)$.

$$F_1(X) = \sum_{j=0}^5 a_j X^j, \quad F_2(X) = \sum_{j=0}^5 b_j X^j, \quad F_3(X) = \sum_{j=0}^5 c_j X^j \quad (3.18)$$

Les paramètres a_j , b_j , c_j sont obtenus par la méthode des moindres carrés [Hubbell et al. \(1980\)](#). L'erreur associée à la fonction d'ajustement varie en moyenne de 2.2% à 5% [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#). La section efficace est constante pour les énergies supérieures à 100 GeV, mais en dessous de $E_{low} = 1.5$ MeV l'extrapolation suivante est utilisée :

$$\sigma(E) = \sigma(E_{low}) \cdot \left(\frac{E - 2m_e c^2}{E_{low} - 2m_e c^2} \right)^2 \quad (3.19)$$

Les valeurs de section efficace utilisées dans le modèle *Low-energy* proviennent de la bibliothèque EPDL97.

Une factorisation de l'expression de la section efficace différentielle de *Bethe-Heitler* [Ji \(1997\)](#), permet d'établir une fonction $g(\epsilon)$ qui sera implémentée dans l'algorithme d'échantillonnage de l'énergie emportée par chaque particule créée.

L'échantillonnage de l'angle polaire de l'électron/positron est basé une expression de la section efficace différentielle, définissant la distribution "énergie-angle" [Tsai \(1974\)](#).

3.4.4 Diffusion Rayleigh

Le modèle d'interaction électromagnétique *Standard* ne tient pas compte de la diffusion *Rayleigh*. Le modèle *Penelope* se base sur une formule analytique pour calculer la section efficace de cette interaction [Baró et al. \(1994\)](#).

La diffusion *Rayleigh* est un processus élastique, lorsque le photon incident passe à travers le nuage électronique d'un atome, il est diffusé d'un angle élémentaire, mais son énergie reste conservée. En pratique, pour une énergie inférieure à 250 eV l'interaction est négligée durant la simulation, pour des énergies supérieures le modèle *Low-energy* échantillonne l'angle de diffusion θ à partir de la distribution suivante [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#), [Cullen \(1995\)](#) :

$$\Phi(h\nu, \theta) = F^2(q)(1 + \cos^2 \theta) \sin \theta \quad (3.20)$$

L'équation 3.20 se compose du produit de la fonction de *Rayleigh* indépendante de l'énergie et du carré du facteur relativiste $F(q)$ [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#). Le transfert de la quantité de mouvement au milieu traversé, est exprimé par la variable q :

$$q = 2h\nu \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (3.21)$$

3.5 Interaction des électrons

3.5.1 Seuil de production de particules secondaires

Geant4 est un code de calcul Monte Carlo utilisant la technique de l'*histoire condensée*. L'interaction par collision et la génération du rayonnement de freinage sont simulées par deux modes : continu et discret. Les valeurs du seuil de production (*cut-off*) du rayonnement de freinage et des rayons- δ doivent être spécifiées. En dessous du seuil de production, les pertes d'énergie sont calculées par l'approximation de décélération continue "*continuous slowing down approximation*" (**CSDA**). Cette technique estime le transfert d'énergie en chaque point d'interaction par l'intégrale du pouvoir d'arrêt. Cette approximation (CSDA) permet de modéliser le dépôt d'énergie de l'ensemble des électrons ionisés sur un segment du parcours de la particule chargée en mouvement [Maneval \(2019\)](#).

Le seuil de production de particules secondaires est exprimé dans **Geant4** en termes de distance. Uniquement les particules pouvant avoir une énergie suffisante pour parcourir une distance, obtenue à partir des tables de CSDA, supérieure à la valeur du *cut-off* sont générées. Le *cut-off* est convertit par le noyau de **Geant4** en seuil d'énergie de production de particules secondaires. Par exemple, un seuil de 100 μm pour les électrons correspond à une coupure en termes d'énergie de 990 eV dans l'air, 84.3 keV dans l'eau et 351.4 keV dans le tungstène.

L'utilisateur a la possibilité de grouper les composantes de la géométrie simulée en plusieurs "régions" et d'appliquer différentes valeurs de *cut-off* en fonction de chaque région, ce processus permet d'améliorer l'efficacité du calcul. La valeur minimale du *cut-off* permise correspond à une énergie de 990 eV pour le package *Standard* et peut atteindre 250 eV pour les modèles de simulation d'interactions électromagnétiques *Low energy* et *Penelope*.

3.5.2 Ionisation

Les électrons qui ont une énergie cinétique, T , supérieure au seuil de production T_{cut} subissent des collisions inélastiques simulées dans **Geant4** sous forme de processus discrets. L'énergie maximale transférée à un électron/positron T_{max} , est définie par la formule suivante :

$$T_{max} = \begin{cases} E - m_e c^2 & , \quad \text{for } e^+ \\ \frac{E - m_e c^2}{2} & , \quad \text{for } e^- \end{cases} \quad (3.22)$$

Si l'énergie cinétique de l'électron est inférieure à T_{cut} , les pertes d'énergie sont calculées en fonction du pouvoir d'arrêt restreint par collision et par le modèle de calcul de la fluctuation de l'énergie perdue. La déflexion angulaire est prise en considération par le processus de diffusions multiples.

3.5.2.1 Perte d'énergie continue

Le pouvoir d'arrêt restreint par collision dans le modèle d'interaction électromagnétique *standard* est défini par la formule de *Berger-Seltzer* [Sternheimer et al. \(1984\)](#) dérivée de la théorie de *Bethe-Bloch* :

$$\frac{dE}{dx}(T, T_{cut}) = \frac{2\pi r_e^2 m_e c^2 d_e}{\beta} \left[\log_2 \left(\frac{2(\gamma + 1)}{\frac{I}{m_e c^2}} \right) + F^\pm(\tau, \tau_{up}) - \delta_d \right] \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{E}{m_e c^2}, & \beta^2 &= 1 - \frac{1}{\gamma^2}, & \tau &= \gamma - 1, \\ \tau_{up} &= \min(\tau_c, \tau_{max}), & \tau_c &= \frac{T_{cut}}{m_e c^2} \end{aligned} \quad (3.24)$$

d_e est la densité électronique du matériau. I est l'énergie moyenne d'excitation et δ_d est le facteur correctif de l'effet densité [Sternheimer \(1952\)](#).

τ_{max} est égale à τ pour les positrons et $\tau/2$ pour les électrons.

Les fonctions $F^\pm(\tau, \tau_{up})$ sont basées sur la formulation de la section efficace des positrons et des électrons proposée par *Møller et Bahabha* [Bhabha \(1936\)](#), [Seltzer & Berger \(1984\)](#).

Lorsque $\tau_{up} = \tau_c$ l'équation 3.23 devient équivalente à celle proposée dans le rapport N° 37 de l'ICRU.

Le modèle d'interaction électromagnétique *standard* utilise une extrapolation pour calculer le pouvoir d'arrêt lorsque l'énergie cinétique de l'électron est en dessous de $0.25\sqrt{Z_{eff}}$ keV, Z_{eff} est le nombre atomique effectif du matériau traversé. Cette extrapolation est un complément de la théorie de *Bethe* valable pour les énergies supérieures à 10 keV.

TABLE 3.2: Énergie moyenne d'excitation de quelques éléments.

Élément	ICRU 37 I (eV)		<i>Geant4 standard</i>
	phase gazeuse	phase condensée	I (eV)
H	19.2	19.2	21.8
C	70	81	78.0
N	82	82	81.9
O	97	106	95.2
F	-	112	103.5
Cl	-	180	173.4

Les énergies d'excitation I tab.3.2 sont prises du rapport N° 37 de l'ICRU. Une seule valeur de I est attribuée à chaque élément, même si l'énergie moyenne d'excitation peut changer en fonction de la phase de l'élément. Lorsqu'il s'agit d'un milieu composé de plusieurs atomes, la règle de *Bragg* [Bragg & Kleeman \(1905\)](#) est utilisée

TABLE 3.3: Valeurs de l'énergie moyenne d'excitation publiées dans le rapport 37 de l'ICRU et valeurs utilisées dans le modèle d'interaction électromagnétique *standard* de **Geant4**, pour sept matériaux.

Matériau	I (eV)		Différence relative (%)
	ICRU 37	Geant4 <i>standard</i>	
Béryllium	63.7	63.6	-0.1
Os	91.9	86.5	-5.9
Cuivre	322	321.9	-0.03
Air	85.7	85.6	-0.1
Kapton	79.6	76.4	-4.0
Eau liquide	75.0	70.9	-5.5
Tungstène	727	725.2	-0.2

pour calculer l'énergie moyenne d'excitation :

$$\log_2 I = \frac{\sum_j N_j Z_j \log_2 I_j}{\sum_j N_j Z_j} \quad (3.25)$$

N_j est le nombre d'atomes de l'élément j par unité de volume du milieu, Z_j le nombre atomique, I_j est l'énergie d'excitation de l'atome j .

Le rapport N° 37 attribue pour certains éléments différentes valeurs de l'énergie moyenne d'excitation en fonction de la phase, ce qui donne plus de précision au calcul de l'ionisation moyenne par la règle de *Bragg* tab.3.2.

Une comparaison entre les valeurs de l'énergie moyenne d'excitation publiées par l'ICRU dans le rapport N° 37 et les valeurs utilisées dans le modèle d'interaction électromagnétique *standard* de **Geant4** montre une différence de l'ordre de 5% pour l'eau et l'os tab.3.3. Ces valeurs peuvent être substituées dans le code source **Geant4**.

Le facteur correctif δ de l'effet densité est très important dans l'équation du pouvoir d'arrêt par collision eq.3.23, particulièrement pour les milieux denses à haute énergie. Le facteur δ est calculé par la formulation proposée par *Sternheimer et Peierls* [Sternheimer & Peierls \(1971\)](#).

3.5.2.2 Rayon δ

Un rayon δ est un électron secondaire ionisé après interaction avec une particule chargée rapide et qui peut provoquer d'autres ionisations sur sa trajectoire [Podgorsak \(2003\)](#). La simulation de la production des rayons δ au-dessus de l'énergie de coupure T_{cut} est considérée comme un processus discret. La section efficace totale est calculée dans le modèle de l'ionisation du package *Standard*, par l'intégrale suivante [Geant4 Collaboration et al. \(2016\)](#) :

$$\sigma(Z, E, T_{cut}) = \int_{T_{cut}}^{T_{max}} \frac{d\sigma(Z, E, T)}{dT} dT, \quad (3.26)$$

Z est le nombre atomique du matériau traversé, E est l'énergie totale de la particule incidente, T_{max} est l'énergie cinétique maximale transférée à l'électron δ . La section efficace différentielle $d\sigma/dT$ est définie par le modèle de *Møller* [Møller \(1932\)](#) pour les électrons et le modèle de *Bhabha* pour les positrons [Bhabha \(1935\)](#). Les énergies de coupure pour les modèles de *Møller* et *Bhabha* sont respectivement égales à $2T_{cut}$ et T_{cut} .

L'énergie de l'électron δ est échantillonnée à partir de l'expression de la section efficace différentielle en appliquant la méthode de composition-rejet [Butcher & Messel \(1960\)](#). Les valeurs de l'angle de diffusion et l'énergie de l'électron éjecté sont déterminées par les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion. Dans le modèle de l'ionisation du package *Standard*, l'énergie de liaison de l'électron est négligée dans le calcul.

3.5.3 *Bremsstrahlung*

Le photon de freinage est émis par l'électron si son énergie cinétique, T , est supérieure au seuil de production du rayonnement *Bremsstrahlung*. En dessous du seuil de production du rayonnement de freinage ω_{cut} , l'énergie déposée par l'électron dans le milieu traversé est calculée en fonction du pouvoir d'arrêt restreint, sans simulation de production de particules secondaires.

3.5.3.1 Perte d'énergie continue

Dans le modèle *bremsstrahlung* du package *Standard*, le pouvoir d'arrêt restreint par rayonnement est calculé à partir d'une fonction d'ajustement appliquée à 4000 points couvrants la gamme d'énergie allant de 10 keV à 10 TeV, pour 8 éléments différents. L'erreur estimée est de l'ordre de 10 à 15% lorsque l'énergie de l'électron est inférieure à 1 MeV et varie de 5 à 6% pour les énergies supérieures.

3.5.3.2 Simulation des photons *Bremsstrahlung*

La section efficace d'interaction totale par production de rayonnement *bremsstrahlung* modélisé dans le package *Standard*, est basée sur une fonction d'ajustement similaire à celle utilisée pour le calcul du pouvoir d'arrêt des particules chargées. L'erreur associée à cette fonction par rapport aux valeurs tabulées de *Berger-Seltzer* est de l'ordre de 10–15% lorsque l'énergie cinétique de l'électron est inférieure à 1 MeV et varie de 5 à 6% ailleurs [Geant4 Collaboration \(2014\)](#).

L'énergie du photon de freinage est échantillonnée à partir des spectres de *Seltzer* et *Berger*. Une fonction d'ajustement reproduit les valeurs tabulées du spectre avec une erreur moyenne de 2 à 3% pour les énergies supérieures à 50 MeV. L'erreur obtenue augmente lorsque l'énergie est inférieure à 50 MeV. L'angle de diffusion du

photon généré est échantillonné de la distribution suivante [Tsai \(1974\)](#), [Geant4 Collaboration \(2014\)](#) :

$$f(u) = C(u \exp(-0.625u) + 27u \exp(-1.875u)) \quad (3.27)$$

C est une constante et u est une variable faisant la liaison entre l'énergie totale de l'électron incident, sa masse m_e et son angle de diffusion θ :

$$u = \frac{E\theta}{m_e} \quad (3.28)$$

La fonction eq.3.27 est une approximation basée sur l'expression de la section efficace différentielle de *Tsai* [Tsai \(1974\)](#).

3.5.4 Diffusions multiples

Le premier modèle de diffusion multiple implémenté dans **Geant4** est décrit par la théorie de *Lewis* [Lewis \(1950\)](#), [Kawrakow & Bielaiew \(1998\)](#). Ce processus est utilisé pour simuler l'interaction de toutes les particules chargées.

Deux modèles ont été introduits pour modéliser la diffusion multiple des particules chargées, il s'agit du modèle de *Goudsmit-Saunderson* [Kadri et al. \(2009\)](#) et du modèle de *WentzelVI* [Ivanchenko et al. \(2010\)](#).

3.5.5 Annihilation des positrons

Le processus d'annihilation est simulé par **Geant4** à travers les deux modèles *Standard* et *Penelope*. Le positron peut être en mouvement ou au repos. Pour les deux modèles la même formule de section efficace est utilisée [Heitler \(1954\)](#).

3.5.6 Step limitations

La longueur du *step* d'une particule est liée au processus physique associé et aux considérations géométriques. Le calcul précis de l'énergie perdue par la particule nécessite un *step* infinitésimal. Le code **Geant4** fournit des outils de contrôle à travers la classe `G4UserLimit` permettant de fixer l'intervalle de variation de la longueur du *step*. En cas d'utilisation de cette interface, les valeurs appliquées par l'utilisateur doivent être choisies avec précaution.

3.5.7 Énergie par *step*

L'énergie moyenne perdue par un électron durant un *step* de son *histoire condensée* est calculée avec l'équation 3.29 [Geant4 Collaboration \(2014\)](#).

T_0 et r_0 sont respectivement l'énergie cinétique et la portée de la particule, calculées au début du *step* s .

k est un paramètre arbitraire. La fonction f_T donne l'énergie cinétique de la particule en fonction de la portée calculée à partir des tables de pouvoir d'arrêt restreint. La perte d'énergie durant le *step* est calculée à partir de l'équation 3.29 combinée avec un modèle simulant les fluctuations statistiques de l'énergie déposée (*energy straggling*) [Lassila-Perini & Urbán \(1995\)](#).

$$\Delta T = \begin{cases} T_0 - f_T(r_0 - s) & , \quad s \geq k.r_0 \\ s \left| \frac{dE}{dx} \right| & , \quad \text{ailleurs} \end{cases} \quad (3.29)$$

3.6 Architecture d'une application utilisateur

Geant4 est un code Monte Carlo libre écrit en C^{++} [Yang \(2000\)](#) permettant de décrire la géométrie détaillée d'un système, modéliser le transport de particules, enregistrer et accumuler une grandeur d'intérêt au cours d'un calcul et générer par la suite des fichiers contenant les résultats, sous format **ASCII**, **ROOT**⁷, ou tout autre format implémenté par l'utilisateur.

Une application utilisateur se doit de respecter une architecture définie par les développeurs du code **Geant4** pour garantir son bon fonctionnement. Chaque fonctionnalité de **Geant4** est contrôlée par un ensemble de classes C^{++} appartenant à l'une des catégories principales fig.3.1. **Geant4** supporte aussi l'exécution en mode parallèle. La structure de base du code utilisateur est toujours la même que ça soit en mode séquentiel ou en mode parallèle [Dong et al. \(2012\)](#).

Nous discuterons dans les deux sections qui suivent les classes C^{++} indispensables pour compiler une application **Geant4**, ainsi que les changements principaux à introduire au code pour qu'il soit compatible à l'exécution parallèle dans l'objectif d'améliorer sensiblement la performance de la simulation.

3.6.1 Exécution séquentielle

Le programme principal de l'utilisateur défini en C^{++} par la fonction `main()`, contient l'initialisation de six objets principaux fig.3.5 :

1. **G4Random** : cette classe permet de définir le générateur de nombres aléatoires qui sera utilisé par la suite pour l'échantillonnage de toute variable aléatoire utilisée dans la simulation. L'utilisateur peut choisir une parmi plusieurs possibilités (**HepJamesRandom**, **MixMaxRng**, **RanecuEngine**, **TRandom3**, ...).
2. **G4RunManager** : c'est une classe qui gère la communication entre les différents objets instanciés durant la simulation. Ce gestionnaire permet d'assurer les fonctionnalités principales suivantes :
 - (a) initialisation des modes d'interactions simulés,
 - (b) initialisation de la géométrie simulée,

7. **ROOT** : package modulaire d'analyse de données statistiques, visualisation et stockage. Cette bibliothèque écrite en C^{++} a été développée par le CERN.

- (c) gestion de la boucle des événements primaires simulés et
 - (d) libération de la mémoire à la fin de l'exécution et suppression des objets associés.
3. **G4VUserDetectorConstruction** : Les classes dont le nom commence par **G4V** sont des classes virtuelles [Yang \(2000\)](#), [Alexandrescu \(2001\)](#) contenant des procédures virtuelles. La définition de chaque fonction virtuelle se fait à travers l'instanciation d'une classe héritière à travers laquelle l'utilisateur déclare :
- (a) la géométrie du système simulée,
 - (b) les attributs de visualisation graphique, par exemple la couleur et le style d'affichage de chacune des composantes du système modélisé et
 - (c) les seuils de production de particules secondaires (*cut-off*) par région.
4. **G4VModularPhysicsList** : cette classe permet la définition des processus physiques d'intérêt pour l'utilisateur. Le code **C++** est déjà défini pour l'ensemble des processus physiques en basse et haute énergie.
- Le constructeur **G4EmStandardPhysics_option1/2/3** décrit le modèle d'interaction électromagnétique *Standard* implémenté dans **Geant4**. Trois options sont disponibles en fonction de la gamme d'énergie des particules simulées. La classe de gestion des processus physiques simulés assure :
- (a) La sélection des modes d'interaction d'intérêt et les types de particules simulées.
 - (b) La définition des valeurs par défaut de seuil de production de particules secondaires.
 - (c) La définition de la valeur maximale permise du *step*.

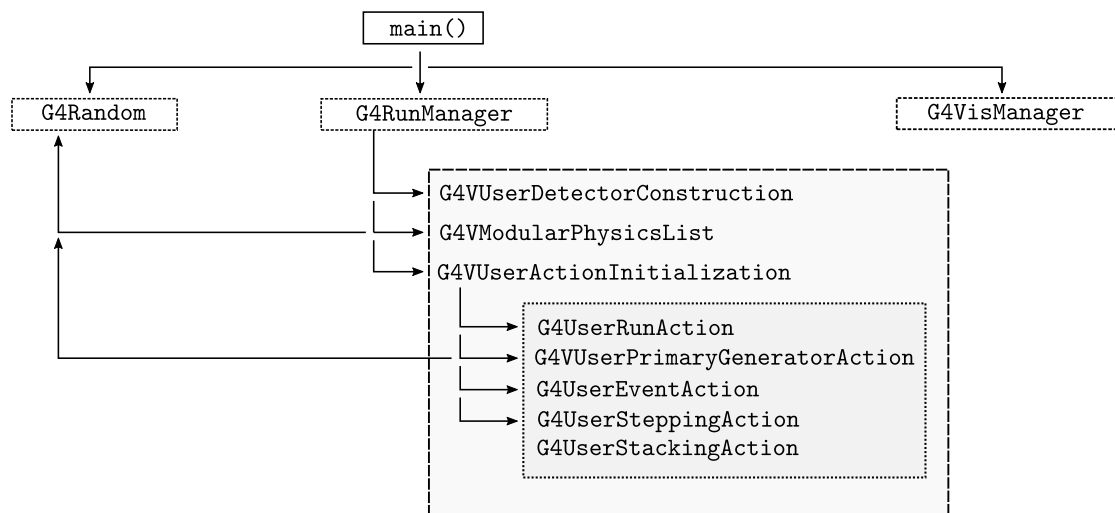


FIGURE 3.5: Les classes **Geant4** de base, appelées par le noyau du code durant l'exécution. La zone en gris représente les classes définies par l'utilisateur. La complexité du code changera en fonction de la complexité de la source de particules primaires, la géométrie simulée et les grandeurs calculées.

L'utilisateur peut directement choisir l'une des listes des processus physiques de référence, proposées par **Geant4** sans instancier sa propre classe. Nous citons quelques exemples :

- **LHEP** : *Low and High Energy Parameterization*. Ce paquet est le plus rapide en termes de temps de calculs mais également le moins précis.
- **QGSP_BERT** : *Quark Gluon String Model ; Bertini Cascade Model*. Cette liste est désignée pour simuler les expériences de physique des hautes énergies.
- **QGSP_BIC_HP** : *Quark Gluon String Model ; Binary Cascade Model ; High Precision Neutron Model*. Ce paquet est le mieux adapté pour les application de radio-protection et de physique médicale.

5. **G4VUserActionInitialization** : un objet dérivé de cette classe joue le rôle d'interface permettant d'initialiser d'autres classes implémentées et définies par l'utilisateur :

- (a) **G4UserRunAction** : à travers cette classe l'utilisateur peut coder les actions à exécuter immédiatement avant le début et à la fin de la simulation (**Run**).
- (b) **G4VUserPrimaryGeneratorAction** : cette classe est utilisée généralement pour définir les propriétés d'une source de particules primaires à caractère complexe.
- (c) **G4UserEventAction** : cette classe permet de définir les actions à exécuter au début et à la fin de chaque événement (transport d'une particule primaire). Par exemple, l'énergie moyenne déposée dans un volume par événement primaire peut être calculée en utilisant cette classe.
- (d) **G4UserSteppingAction** : à travers cette classe **Geant4** donne la possibilité d'accéder à toutes les informations concernant une particule en mouvement après chaque *step*, le mode d'interaction, la quantité d'énergie déposée, le milieu dans lequel la particule se déplace ...
- (e) **G4UserStackingAction** : permet à l'utilisateur d'avoir accès à la pile de particules secondaires créées après une interaction et de récupérer les informations liées à ces particules.

6. **G4VisManager** : cette classe permet d'initialiser une interface de visualisation graphique pour s'assurer du bon positionnement des différentes composantes du système simulé et éviter le chevauchement des volumes. Elle permet également de générer des figures de très bonne qualité pour la documentation et l'illustration.

3.6.2 Exécution parallèle

L'augmentation de la vitesse de calcul se fait actuellement par l'augmentation du nombre de cœurs montés sur le même circuit intégré, c'est le principe du processeur multi-cœurs. Cette configuration utilise une mémoire partagée entre plusieurs cœurs. Pour exploiter la puissance de calcul offerte par les processeurs de dernière génération, les applications exécutées devraient supporter le concept de parallélisme *multi-threading* [Akkary & Driscoll \(1998\)](#).

La collaboration **Geant4** a commencé l'adaptation du code pour supporter le *multi-threading* en 2007. La première version parallèle du code nommée **Geant4-[mt]** a été publiée en décembre 2011 [Cosmo et al. \(2014\)](#). **Geant4-[mt]** est basé sur des notions déjà implémentées dans d'autres extensions du code telle que **ParGeant4** [Cooperman et al. \(2000\)](#). Sur une machine possédant k cœurs, le processus **Geant4-[mt]** est subdivisé en k sous-processus partageant certains objets pour optimiser l'usage de la mémoire. Chaque sous processus fait un calcul indépendant et à la fin de la simulation les résultats des k sous-processus indépendants sont fusionnés [Dong et al. \(2012\)](#).

La version 10 du code **Geant4** permet de faire une simulation parallèle des événements simulés. Le nombre d'applications exécutées en même temps (**number of threads**) dépendra de la puissance du processeur multi-cœurs utilisé. La simulation **Geant4-[mt]** sera gérée par une application globale appelée **master thread** qui va subdiviser le calcul en k applications locales appelées **worker thread** fig.3.6. Les événements simulés par chaque **thread** sont indépendants, seules les données de la géométrie et de certains processus physiques sont partagées entre ces applications locales.

Le code utilisateur devrait légèrement changer afin d'adapter l'application résultante à l'exécution parallèle. La classe **G4MTRunManager** remplacera la classe de gestion **G4RunManager** du mode séquentiel. Un deuxième changement très important concerne la définition des parties du code exécutées par tous les **threads**, notamment la partie détecteur et calcul des grandeurs d'intérêt (*scoring*).

La définition de la partie détecteur représentée par les volumes sensibles utilisés pour calculer les différentes quantités physiques, devrait être impérativement effectuée dans la fonction virtuelle **CreateSDandField** dérivée de la classe virtuelle **G4VUserDetectorConstruction**. Cette fonction est appelée automatiquement par le noyau de **Geant4-[mt]** durant l'exécution de chaque **thread** indépendant.

Il est nécessaire de vérifier que les classes C^{++} permettant à l'utilisateur de manipuler et de personnaliser la simulation sont correctement codées, surtout lorsque des interdépendances sont présentes.

La définition de la classe **G4VUserActionInitialization** optionnelle en cas d'exécution séquentielle, devient indispensable en cas d'exécution parallèle [Cosmo et al. \(2014\)](#). Cette classe initialise les objets nécessaires pour chaque **thread** indépendant (**G4VUserPrimaryGeneratorAction**, **G4UserSteppingAction**, **G4UserStackingAction**) et les sépare des objets globaux instanciés une seule fois (**G4UserRunAction**).

L'utilisateur a le libre choix de se servir des classes **Geant4** fournies et adaptées au *multi-threading* pour fusionner les résultats des calculs, surtout lorsqu'ils sont représentés sous forme d'histogrammes. Cependant, l'utilisateur peut coder ses propres classes pour gérer les données calculées par les k **threads**, les fusionner et les sauvegarder sous un format adéquat.

La collaboration **Geant4** a mis au service des utilisateurs un [guide](#) détaillé montrant les étapes à suivre pour assurer une migration fluide et facile du mode séquentiel au mode *multi-threading*.

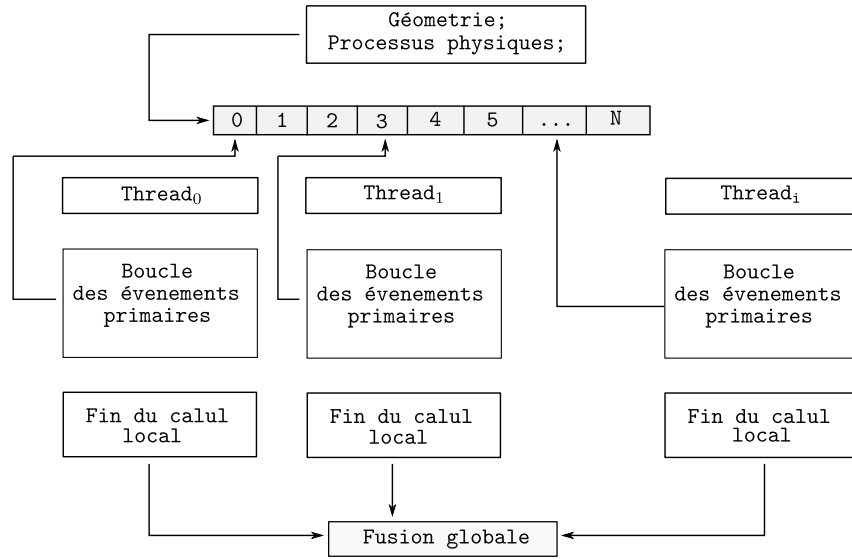


FIGURE 3.6: Décomposition d'un calcul parallèle en k **threads** indépendants. Chaque application parallèle initialise le générateur de nombres aléatoires par une valeur appelée **seed**.

3.7 Options d'optimisation

Nous avons indiqué dans le chapitre précédant que l'amélioration de l'efficacité d'une simulation MC est basée sur la minimisation de la variance, la diminution du temps de calcul ou encore une combinaison entre les deux possibilités eq.2.70. Afin d'avoir une bonne efficacité, il est fortement recommandé de lancer un nombre énorme d'événements primaires, ce qui implique logiquement un temps excessif de calcul. Dans la présente section, nous allons citer brièvement les options générales pour améliorer l'efficacité d'une simulation MC indépendamment de la puissance des ressources de calcul en disposition. L'adoption de l'une des procédures suivantes permettra d'atteindre cet objectif :

1. Utilisation des méthodes de réduction de variance : ensemble des techniques pour réduire l'estimateur de variance d'une grandeur calculée. La roulette russe et le *bremsstrahlung splitting* représentent l'exemple typique d'approches combinées mises en œuvre dans le cas de la simulation des accélérateurs linéaires médicaux [Kawrakow et al. \(2004\)](#).
2. Optimisation du *cut-off* : Le seuil de production de particules secondaires est souvent utilisé comme paramètre d'optimisation réduisant le temps CPU nécessaire pour achever une simulation. Cette variable permet de choisir le seuil en énergie à partir duquel les particules secondaires sont créées et simulées. En dessous de cette valeur limite, la particule en question cède son énergie au milieu traversé sans qu'il y ait simulation de particules secondaires de faible énergie [Grevillot et al. \(2010\)](#), [Arce & Lagares \(2018\)](#).
3. Optimisation du *Step limit* : **Geant4** permet à l'utilisateur de choisir le seuil minimal en énergie cinétique en dessous duquel le **tracking** de la particule est interrompu. Dans cette situation l'énergie cinétique restante est déposée localement [Arce & Lagares \(2018\)](#).

4. Optimisation de la navigation des particules dans une géométrie voxelisée : la technique consiste à réduire le nombre de voxels dans la géométrie simulée par utilisation d’algorithmes de maillage fusionnant les voxels de même densité. Cette méthode permet de réduire le temps CPU perdu lorsque la particule s’approche des bords d’un voxel [Sarrut & Guigues \(2008\)](#), [Arce et al. \(2008\)](#).
5. Utilisation de **Geant4-[mt]**, la version *multi-thread* du code **Geant4** permet une meilleure exploitation de la puissance de calcul des processeurs multi-cœurs.

3.8 Conclusion

Geant4 est un code de simulation Monte Carlo des interactions rayonnement-matière à licence libre, profitant de la flexibilité de la programmation orientée objet. Il est caractérisé par une architecture modulaire, facilitant l’accès aux fonctionnalités des différentes composantes du code. Les plus complexes des géométries, peuvent être modélisées grâce à une interface permettant d’importer les fichiers de conception assistée par ordinateur (CAO).

Le code permet de simuler une variété de processus physiques à travers des modèles théoriques utilisant les valeurs des tables de sections efficaces d’interactions prises de bibliothèques validées. La gamme d’énergie simulée pour les processus physiques électromagnétiques commence de 250 eV et atteint approximativement 1 PeV.

Dans la version 10 du code, le concept de *multi-threading* a été introduit pour adapter **Geant4** à l’exécution parallèle. Plusieurs études ont été réalisées pour estimer la précision de la version parallèle du code **Geant4-[mt]**, validée par plusieurs travaux et papiers publiés [Dong et al. \(2012\)](#), [Dotti et al. \(2015\)](#), [Han et al. \(2018\)](#).

Le développement et l’amélioration du code **Geant4** sont toujours maintenus à travers l’effort de plusieurs collaborations et instituts scientifiques participant à ce projet, aussi bien qu’à travers la contribution de la communauté des utilisateurs du code partout dans le monde. Au début **Geant4** a été désigné pour la simulation des expériences de la physique des hautes énergies, actuellement le domaine d’application englobe d’autres disciplines telles que la physique médicale et l’astrophysique.

Chapitre 4

Élaboration et développement sous Geant4-[mt] d'un modèle de sources virtuelles

4.1 Introduction

Les méthodes de calcul MC représentent un outil efficace pour estimer le dépôt de dose par un rayonnement ionisant dans la matière. Ces méthodes ont été utilisées depuis plusieurs années en radiothérapie pour calculer les propriétés dosimétriques d'un faisceau d'électrons ou de photons généré par un accélérateur linéaire médicale [Andreo \(1991\)](#) ; et pour améliorer la conception de ces machines afin de perfectionner le contrôle thérapeutique.

L'approche numérique MC est généralement très gourmande en termes de temps d'exécution sur ordinateur. Un très grand nombre d'événements primaires est nécessaire pour réduire l'incertitude statistique du calcul, surtout lorsque la distribution de dose est déterminée dans des voxels de très petite taille. L'utilisation des espaces des phases reste la méthode commune la plus utilisée pour améliorer l'efficacité du calcul. La simulation de la tête d'irradiation d'un accélérateur linéaire est divisée en deux étapes. La première consiste à générer l'espace des phases représentant un échantillon des états possibles qu'une particule peut prendre en dessous des composantes statiques principales : la cible, le collimateur primaire et le filtre égalisateur ; la deuxième étape consiste à utiliser l'espace des phases calculé pour générer les particules durant la simulation du dépôt de dose dans un fantôme.

L'efficacité de l'utilisation des espaces des phases a été évaluée dans plusieurs travaux [Deng et al. \(2000\)](#), [Ma et al. \(1997\)](#). Cependant, le stockage des fichiers contenant les informations d'un très grand nombres de particules nécessite un espace mémoire gigantesque et complique la manipulation et le transfert de données. Le nombre fini de particules dans un espace des phases induira le recyclage du même ensemble de particules primaires lorsque le nombre d'événements simulés est largement supérieur au nombre de particules stockées dans l'espace des phases, ce qui représente un facteur amplifiant l'incertitude sur le calcul de dose [Walters et al. \(2002\)](#).

Le concept de modèle de sources virtuelles ([MSV](#)), dérivés à partir de mesures expérimentales [Jiang et al. \(2000\)](#), [Fippel et al. \(2003\)](#), représente une méthode alternative permettant d’éviter ce genre de problèmes. La précision de cette approche dépend de sa capacité à reproduire les corrélations entre les différentes variables décrivant l’état d’une particule. Une modélisation incorrecte peut mener à une large différence entre le faisceau de photons original et celui reconstruit avec le MSV.

Certains MSV se basent sur une approche probabiliste pour déterminer la position initiale, le vecteur direction et l’énergie d’une particule. Les spectres en énergie peuvent être représentés par la superposition de plusieurs sources mono-énergétiques pondérées [Rucci et al. \(2014, 2016\)](#). D’autres modèles définissent une source de rayonnement primaire et une source de rayonnement diffusée décrite par plusieurs distributions angulaires et spectres en énergie. Ces distributions sont ajustées par des densités de probabilité [González et al. \(2015\)](#).

Nous présentons dans ce travail, un MSV dérivé des fichiers d’espaces des phases disponibles dans la base de données publique de l’AIEA. Une méthode de séparation est proposée pour différencier les photons primaires issus de la cible de l’accélérateur, des photons diffusés provenant de toutes composantes au-dessus du plan de l’espace des phases. Un algorithme de reconstruction a été développé pour chacune des deux composantes du faisceau. Le collimateur que nous avons utilisé pour délimiter les champs d’irradiation est constitué de deux paires de mâchoires en plomb (X/Y).

La validation du modèle et le calcul de la distribution de dose ont été réalisés avec le code MC [Geant4](#) [Agostinelli et al. \(2003\)](#), [Allison et al. \(2016\)](#) en mode d’exécution parallèle [Geant4-\[mt\]](#) [Dong et al. \(2012\)](#) pour augmenter la rapidité de calcul. Les courbes de rendement en profondeur et de profil de dose obtenues par le MSV ont été comparées avec des distributions de dose de référence calculées en utilisant les espaces des phases originaux. Cette évaluation fait appel à deux outils de comparaisons, l’indicateur γ_{index} et le concept de *Distance To Agreement (DTA)* [Low et al. \(1998\)](#), [Van Dyk et al. \(1993\)](#), des détails supplémentaires sont données dans la section annexe [A](#). Le MSV a été validé pour trois faisceaux de photons représentés par les espaces des phases de l’accélérateur *Elekta Precise* pour les faisceaux 6 MV/10 MV et l’accélérateur *Varian TrueBeam* pour l’énergie nominale 6 MV.

4.2 Matériels et méthodes

4.2.1 Représentation des espaces des phases

L’utilisation des espaces des phases a été introduite dans la simulation des accélérateurs linéaires médicaux principalement pour minimiser le temps de calcul. Un espace des phases représente un échantillon statistique des états qu’une particule peut prendre à une position selon l’axe (OZ). L’emplacement de l’espace des phases se situe sur l’axe du faisceau, généralement en dessous de la partie invariable de l’accélérateur. La position, le vecteur direction, l’énergie, le poids statistique et le type de chaque particule, sont des informations écrites dans un fichier ASCII ou binaire

suivant les normes standards des espaces des phases de l'AIEA, d'autres formats personnalisés peuvent être utilisés.

L'espace des phases ne représente pas uniquement la fluence de particules provenant de la cible, mais aussi tout rayonnement diffusé issu du collimateur primaire et du filtre égalisateur fixé au-dessus du collimateur secondaire. Cette réalité a poussé certains auteurs à proposer le concept de Modèle de Sources Multiples (MSM), cette approche attribue à chaque composante de l'accélérateur une source virtuelle de rayonnement [Fix et al. \(2001\)](#), [Grevillot, Bertrand, Dessy, Freud & Sarrut \(2011\)](#).

L'AIEA met à disposition des utilisateurs une large gamme de fichiers d'espace des phases pour des faisceaux de photons de plusieurs machines de traitements. Généralement un seul espace des phases contient plusieurs millions de particules ce qui nécessite un espace mémoire de stockage important. Dans ce qui suit, nous discutons une approche visant à compresser les informations contenues dans un espace des phases de l'AIEA. Un algorithme de reconstruction permettra de restituer le faisceau original sur la base des informations extraites. Pour atteindre cet objectif, les corrélations entre la position, la direction et l'énergie d'une particule P_i , sont étudiées.

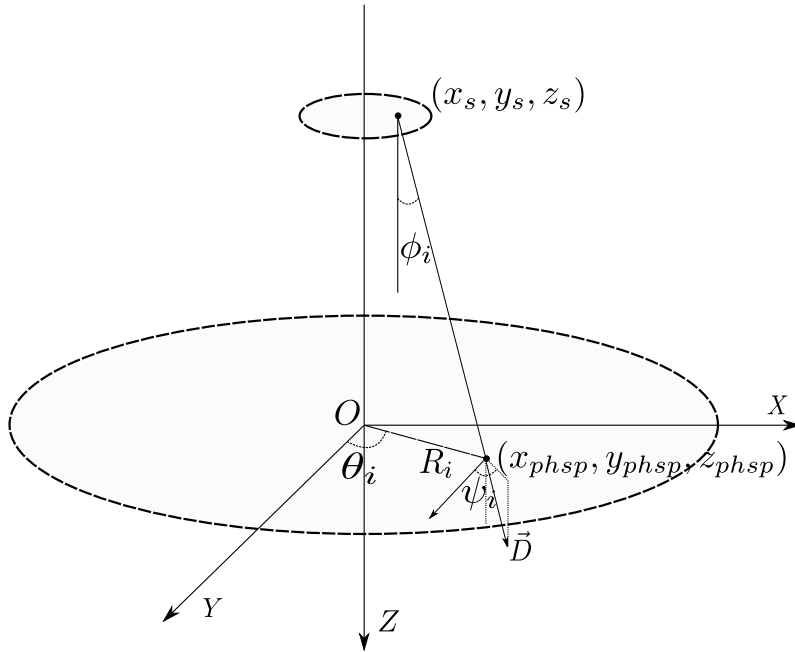


FIGURE 4.1: Représentation simplifiée des variables décrivant une particule générée par le MSM en fonction des variables globales contenues dans le fichier d'espace des phases eq.4.1. La direction d'un photon primaire est calculée en fonction des coordonnées échantillonnées de la distribution spatiale de l'espace des phases et des coordonnées initiales du point de départ du photon, tirées de la distribution spatiale attribuée à la cible.

La convention classique représente la position d'une particule par les coordonnées *cartésiennes* (x, y, z) , la direction par un vecteur unitaire de trois composantes (u, v, w) et l'énergie par un nombre scalaire E . Dans ce travail, nous allons exploiter la symétrie conique du faisceau pour optimiser le nombre de variables utilisées. La position d'une particule est exprimée en fonction de ses coordonnées polaires (R, θ) ,

la direction par deux angles : le premier se situe entre la projection du vecteur direction sur le plan d'espace des phases et l'axe (OY), le deuxième angle se situe entre le vecteur direction et sa projection sur l'axe (OZ), respectivement (ψ, ϕ) eq.4.1 Grevillot, Bertrand, Dessy, Freud & Sarut (2011). Nous considérons uniquement la contributions des photons de l'espace des phases, les électrons et positrons ensemble sont négligés puisqu'ils ne représentent que 1% de la fluence totale ¹.

$$P_i(x, y, z, u, v, w, E) \longmapsto P_i(R, \theta, \psi, \phi, E) \quad (4.1)$$

Une analyse des fichiers d'espace des phases a été effectuée pour dériver deux sources virtuelles principales. Les corrélations entre la position et la direction ont été étudiées pour séparer la fluence totale en deux composantes, primaire et diffusée. Les données d'entrées du MSV élaboré ont été également extraites des fichiers d'espace des phases de l'AIEA pour reconstruire trois faisceaux de photons. La contribution et la méthode de reconstruction de chaque composante du faisceau sont différentes. Le processus de validation a été divisé en deux étapes ; la première est focalisée sur l'évaluation de la qualité de reconstruction du faisceau ; la deuxième concerne l'évaluation de la précision du dépôt de dose calculé par le modèle, à travers une comparaison avec des distributions de références.

4.2.2 Densités de probabilités des variables aléatoires de l'espace des phases

Le contenu des fichiers d'espace des phases de chaque faisceau de photons utilisé pour la validation du MSV, a été représenté premièrement sous forme de densités de probabilité (histogramme), traduisant indépendamment la variation de chacune des variables principales de l'équation 4.1. Un échantillon statistique de 5×10^6 particules a été tiré à partir des fichiers des espaces des phases pour étudier la loi de probabilité de chaque variable aléatoire indépendante.

Les histogrammes unidimensionnels utilisés sont discrétisés en 100 subdivisions, la largeur des canaux Δx_i dépend de la valeur minimale x_{min} et de la valeur maximale x_{max} qu'une variable aléatoire x_i peut prendre. Les densités de probabilité des variables ψ et θ sont uniformément distribuées sur l'intervalle $[0, 2\pi]$. Ce couple de variables sera combiné et étudié en fonction d'une troisième variable résiduelle δ eq.4.2.

$$\delta = \theta - \psi \quad (4.2)$$

Nous allons étudier dans ce qui suit, la distribution spatiale notée par l'histogramme h_R fig.4.2 (a, c, e) ; le spectre énergétique notée h_E fig.4.2 (b, d, f) ; la distribution angulaire de direction notée h_ϕ fig.4.3 (a,c,e) ; et la distribution de δ notée h_δ fig.4.2 (b, d, f). Chaque subdivision de l'histogramme h_R représente un anneau de largeur $\Delta R = R_{max}/100$. La valeur de R_{max} dépend de la dimension du plan de l'espace des phases, de sa position sur l'axe du faisceau et de l'angle d'ouverture du collimateur

1. Ce pourcentage est calculé par analyse des fichiers d'espace des phases de l'accélérateur *Elekta Precise* et *Varian TrueBeam* pour les faisceaux de photons d'énergie nominale 6 MV disponibles sur la [base de donnée](#) publique de l'AIEA

primaire. Nous allons prendre $R_{max} = 100$ mm. Le tirage aléatoire de la position de la particule déterminera l’anneau radial correspondant au canal dans lequel la particule sera classée.

De la même manière la distribution statistique de la variable aléatoire de l’angle de diffusion ϕ et de l’énergie E sont représentées par deux histogrammes h_ϕ et h_E . Les largeurs respectives des canaux sont $\Delta\phi = \phi_{max}/100$ et $\Delta E = E_{max}/100$. $\phi_{max} = \pi/2$ et $E_{max} = 6$ MeV ou $E_{max} = 10$ MeV sont les valeurs extrêmes que l’angle de diffusion et que l’énergie peuvent prendre pour les faisceaux 6/10 MV. Ces histogrammes vont nous permettre de comprendre la variation de chaque variable aléatoire décrivant l’état d’une particule dans l’espace des phases.

Le nombre de particules sur un anneau augmente linéairement en fonction de R pour les trois faisceaux de photons fig.4.2 (a, c, e). Les différences entre les distributions radiales sont plus visibles dans la région de décroissance de la fluence particulaire. La fluence radiale de particules dans l’espace des phases est principalement influencée par la géométrie et la composition du filtre égalisateur et par le collimateur primaire. La forme du cône égalisateur change en fonction de l’énergie du faisceau.

Les spectres en énergie h_E des faisceaux 6 MV des deux accélérateurs sont comparables, l’énergie la plus probable se situe sur l’intervalle $[200, 400]$ keV. D’autres détails complémentaires concernant l’énergie moyenne, minimale et maximale sont résumés dans la table 4.1. Nous remarquons que le pic des photons d’annihilation apparaît clairement dans le cas des faisceaux 6 MV et 10 MV *Elekta Precise* comparé à celui du 6 MV *TrueBeam* fig.4.2 (b, d, f). L’énergie du faisceau d’électrons primaires et la densité de la cible ont un effet majeur sur les spectres simulés. La cible devrait assurer un bon rendement de production de photon, permettre l’arrêt des électrons primaires et éviter un taux important d’auto-absorption de photons Demir et al. (2019). Les paramètres de simulation de la source des électrons primaires peuvent influencer également la forme de la distribution des photons de freinage, nous parlons dans ce cas de l’effet de l’énergie moyenne, de son écart type et de la distribution spatiale des électrons à l’entrée de la cible Verhaegen & Seuntjens (2003).

TABLE 4.1: Analyse statistique du spectre énergétique des particules enregistrées dans les espaces des phases étudiés.

Faisceau		%	E_{min} [MeV]	E_{max} [MeV]	$\langle E \rangle$ [MeV]
<i>TrueBeam</i> 6 MV	$h\nu$	98.8	0.001	6.30	1.23
	e^-	1.1	1.3×10^{-5}	6.15	0.75
	e^+	0.1	0.01	4.70	1.16
<i>Precise</i> 6 MV	$h\nu$	99.4	0.01	5.75	1.32
	e^-	0.5	0.69	5.82	1.69
	e^+	0.1	0.70	4.91	1.81
<i>Precise</i> 10 MV	$h\nu$	99.1	0.01	9.39	2.05
	e^-	0.8	0.69	9.37	2.26
	e^+	0.1	0.69	8.08	2.59

La distribution angulaire h_ϕ fig.4.3 (a,c,e), peut se décomposer en trois régions com-

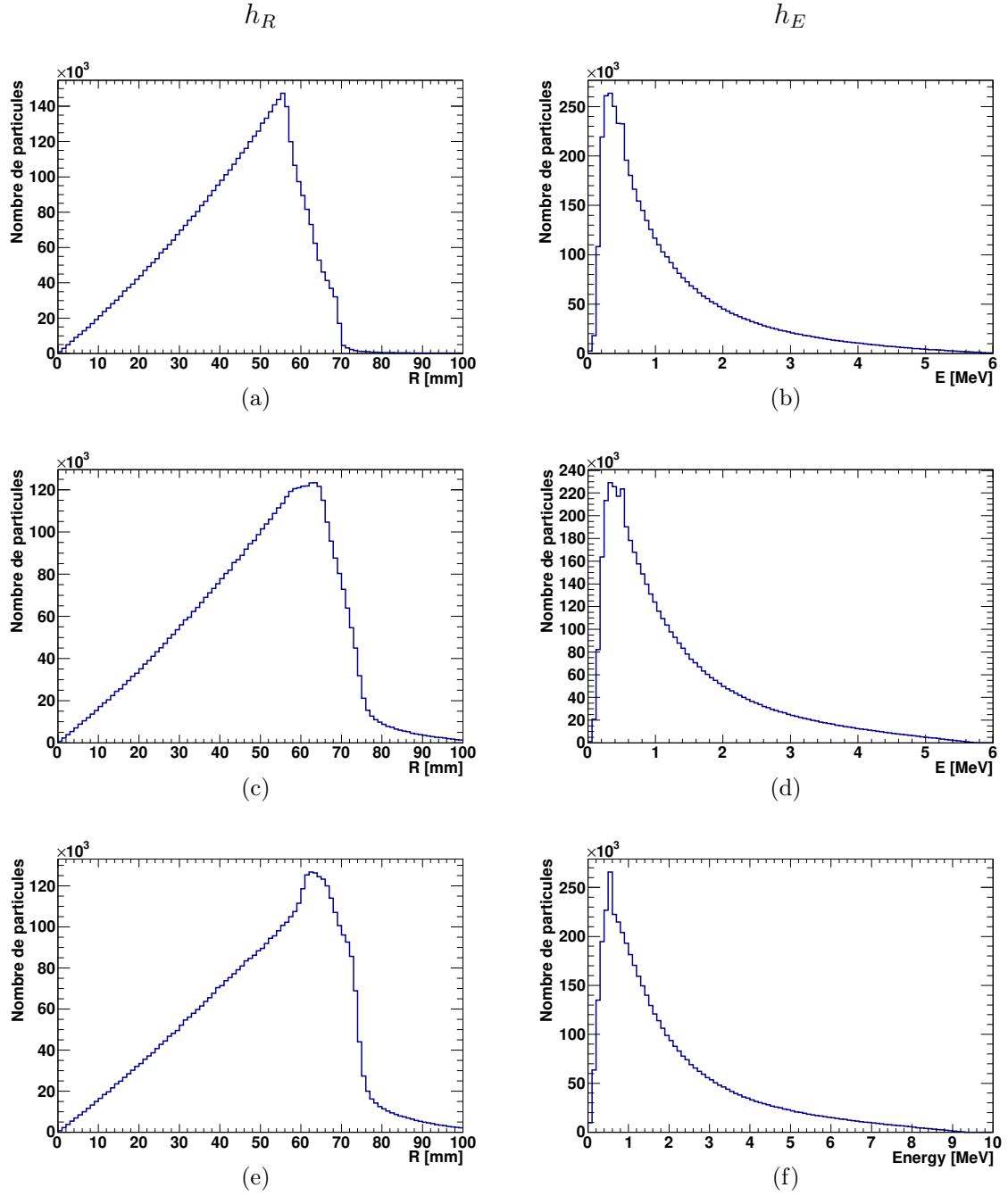


FIGURE 4.2: Représentation de la distribution radiale h_R et du spectre énergétique totale h_E d'un échantillon de 5×10^6 particules pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV ; (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV.

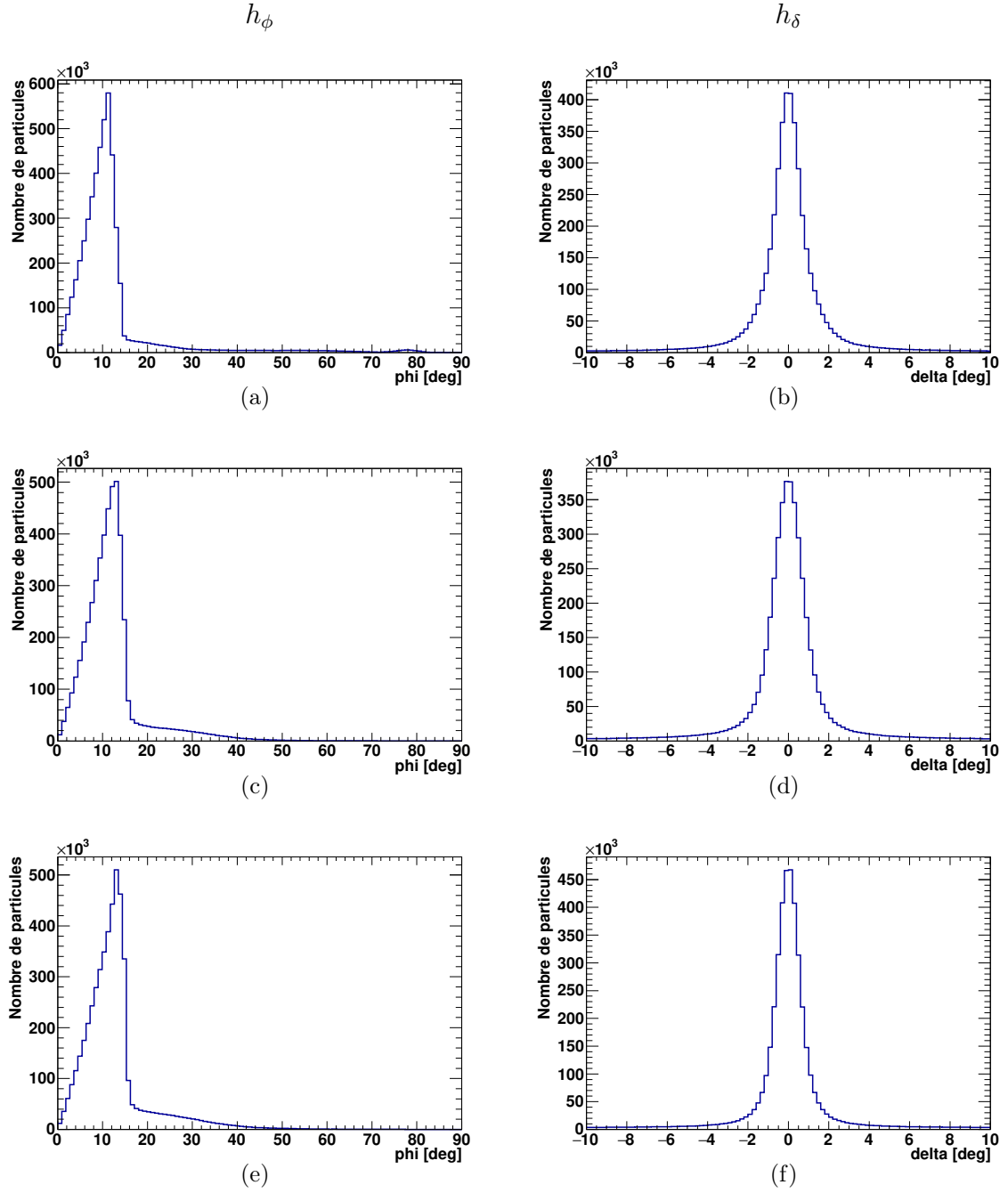


FIGURE 4.3: Représentation de la distribution angulaire h_ϕ et de la distribution δh_δ d'un échantillon de 5×10^6 particules pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (b, c) : *Elekta Precise* 6 MV ; (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV.

parables à celles caractérisant les distributions radiales. La première région montre une croissance linéaire du nombre de particules en fonction de l'angle de diffusion ϕ approximativement dans l'intervalle $[0, 14^\circ]$ pour *Elekta Precise* et $[0, 12^\circ]$ pour *Varian TrueBeam*. La deuxième région montre une chute brutale de la fluence sur un intervalle de quatre degrés. Dans la dernière région, la fluence de particules se stabilise et continue à diminuer lentement en fonction de l'angle de diffusion.

La distribution de δ montre généralement une fluctuation autour de 0 fig.4.3 (b, d, f), pour les trois faisceaux. L'allure de la distribution est presque indépendante de la configuration de l'accélérateur et de l'énergie du faisceau. Nous pouvons conclure que la différence entre l'angle de diffusion ψ et l'angle de position en coordonnées polaires θ est en moyenne nulle, nous observons aussi que la différence maximale notable ne dépasse pas les $\pm 10^\circ$ fig.4.3 (b, d, f).

4.2.3 Variation de la moyenne d'une variable en fonction d'une autre

Dans la section précédente nous avons étudié la densité de chaque variable aléatoire extraite d'un espace des phases. Dans cette section, nous allons mettre en évidence la dépendance moyenne entre deux variables. Différentes combinaisons exprimant la valeur moyenne d'une variable aléatoire en fonction d'une autre, ont été représentées. Quatre fonctions sont explorées pour caractériser chaque faisceau, la variation de l'énergie moyenne des photons en fonction de leurs positions radiales dans l'espace des phases $\langle E \rangle (R)$; de l'angle moyen de diffusion en fonction de l'énergie $\langle \phi \rangle (E)$; de l'angle moyen de diffusion des photons en fonction de leurs positions radiales $\langle \phi \rangle (R)$ et de la différence δ moyenne en fonction de l'angle de diffusion $\langle \delta \rangle (\phi)$ figs.4.4, 4.5.

La dépendance moyenne entre deux variables est calculée en effectuant une classification des particules pour la combinaison de variables étudiée. x et y représentent deux parmi les variables décrivant l'état de la particule eq.4.1. Pour calculer la corrélation moyenne de la variable aléatoire y en fonction de la variable x , nous avons déterminé l'intervalle de variation défini par les valeurs limites x_{min} et x_{max} . Cet intervalle a été subdivisé en n_I canaux de largeur fixe Δx_i :

$$\Delta x_{i=1,2,\dots,n_I} = \frac{x_{max} - x_{min}}{n_I}. \quad (4.3)$$

Les N particules tirées d'un espace des phases sont classifiées en fonction de x en n_I ensembles, pour chaque ensemble la valeur moyenne de $\langle y_i \rangle$ est calculée par la formule :

$$\begin{aligned} \langle y_i \rangle (x_i) &= \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_I} y_i h(i, j), \\ n_i &= \sum_{j=1}^{n_I} h(i, j) \end{aligned} \quad (4.4)$$

n_i est le nombre de particules dans le i^{eme} canal.

x_i est le centre du i^{eme} canal correspondant.

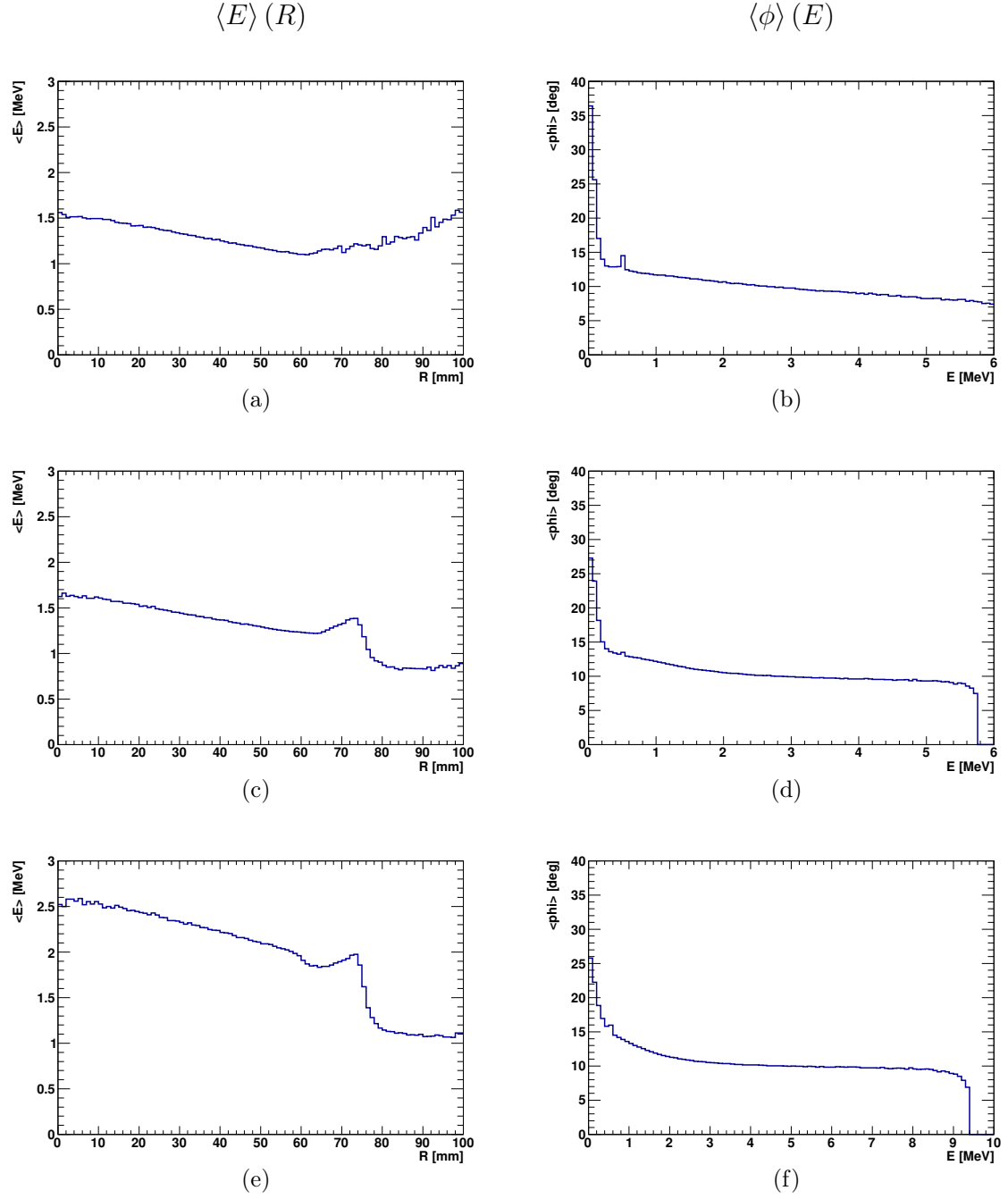


FIGURE 4.4: Corrélation moyenne entre deux variables pour les trois faisceaux étudiés. (a, c, e) : énergie moyenne des photons en fonction de la position radiale sur le plan de l'espace des phases $\langle E \rangle (R)$; (b, d, f) : angle de diffusion moyen en fonction de l'énergie du photon $\langle \phi \rangle (E)$. (a, b) : faisceau 6 MV *Varian TrueBeam*; (c, d) : faisceau 6 MV *Elekta Precise*; (e, f) : faisceau 10 MV *Elekta Precise*.

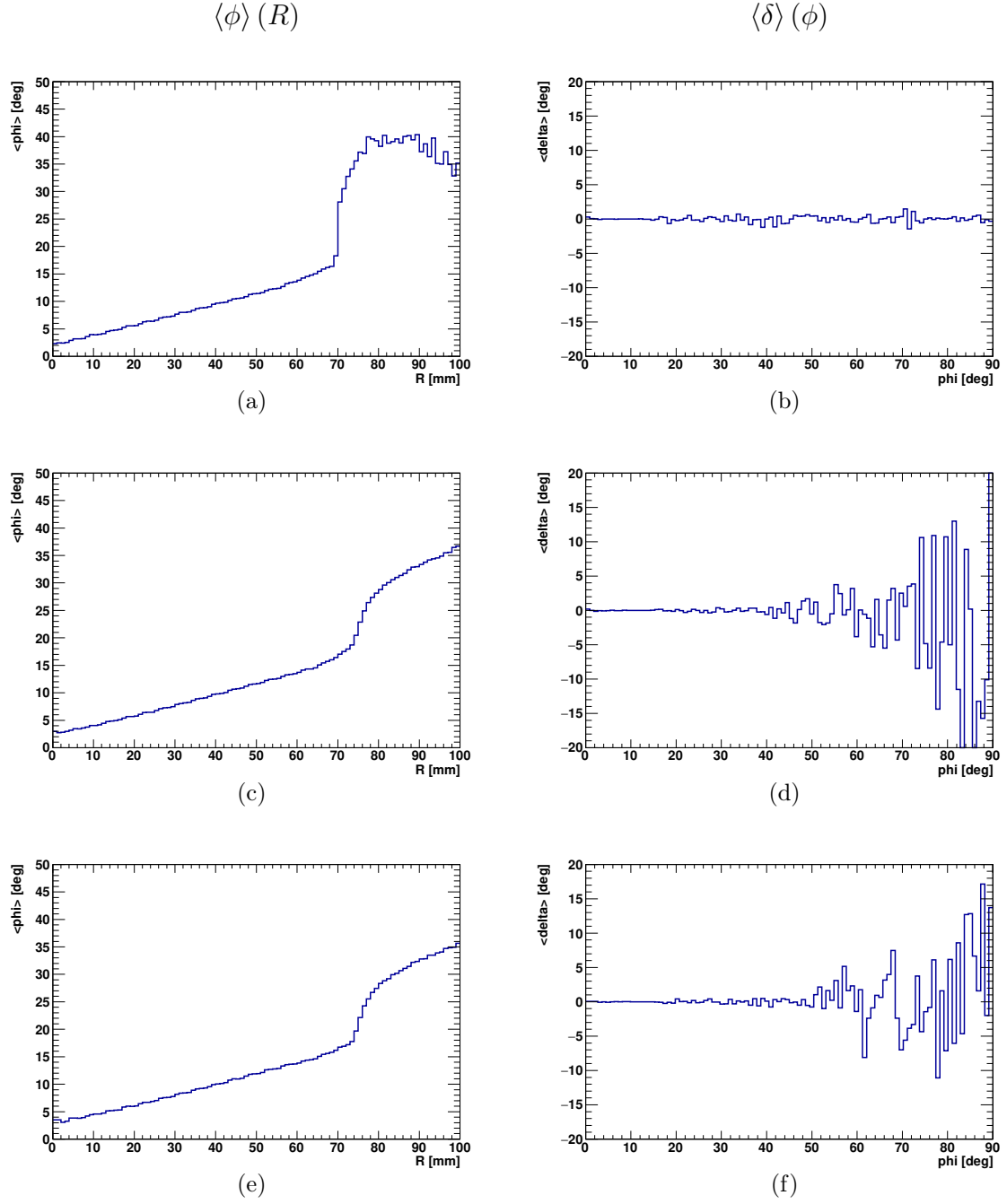


FIGURE 4.5: Corrélation moyenne entre deux variables pour les trois faisceaux d'irradiation étudiés. (a, c, e) : angle de diffusion moyen des photons en fonction de la position radiale sur le plan de l'espace des phases $\langle \phi \rangle (R)$; (b, d, f) : valeur moyenne de δ en fonction de l'angle de diffusion du photon $\langle \delta \rangle (\phi)$. (c, d) : faisceau 6 MV *Varian TrueBeam*; (c, d) : faisceau 6 MV *Elekta Precise*; (e, f) : faisceau 10 MV *Elekta Precise*.

La courbe de l'énergie moyenne en fonction de la position $\langle E \rangle (R)$ fig.4.4, montre une claire dépendance entre ces deux variables. L'énergie moyenne la plus élevée est observée sur l'axe du faisceau, puis elle diminue graduellement en fonction de R . Nous remarquons aussi que la limite supérieure de la région linéaire dans la distribution radiale h_R fig.4.2 correspond bien à une déflexion rapide de la fonction $\langle E \rangle (R)$, probablement à cause de la variation de l'atténuation des photons sur les bords du filtre égalisateur. Cette fonction est fortement influencée par la géométrie, les dimensions et la composition atomique du cône égalisateur.

L'angle de propagation des photons ϕ varie inversement en fonction de l'énergie. La probabilité de diffusion sous un angle supérieur à 15° est plus importante lorsque l'énergie est inférieure à 200 keV et à 600 keV respectivement pour les faisceaux 6 MV et 10 MV fig.4.4. Par ailleurs, l'angle de diffusion moyen se stabilise et diminue lentement en fonction de l'énergie.

La dépendance entre l'angle de diffusion ϕ et la position d'une particule est linéaire à l'intérieur du disque de rayon $r = 70$ mm. Nous pouvons remarquer que la pente de la droite dans cet intervalle est approximativement égale à $0.3^\circ.\text{mm}^{-1}$, pour les trois faisceaux de photons. Le comportement de la fonction change brutalement dans la région adjacente. L'angle ϕ croît rapidement en fonction de R lorsque la position radiale de la particule est supérieure à 70 mm. Ce comportement peut s'expliquer par la faible statistique obtenue pour les angles de diffusion supérieurs à 15° , ces particules sont généralement le résultat d'une diffusion au niveau du collimateur primaire ou du filtre égalisateur fig.4.3 (a, c, e).

La variation de δ en fonction de l'angle moyen de diffusion montre une fluctuation autour de 0° . La dispersion de δ augmente lorsque $\phi > 30^\circ$. L'augmentation de la dispersion est également liée à la faible statistique obtenue pour les particules avec un grand angle de diffusion ϕ .

4.2.4 Étude de la corrélation entre deux variables

Dans la section précédente nous avons évalué la dépendance entre la position, la direction et l'énergie des particules à travers le calcul de la valeur moyenne d'une variable en fonction d'une autre variable. Cette représentation permet de quantifier et de caractériser un faisceau de photons. Dans la présente section, nous allons étudier la corrélation entre deux variables d'une manière plus détaillée, en utilisant des histogrammes bidimensionnels.

Les histogrammes 2D permettent de traduire la corrélation entre deux variables aléatoires, en densité de probabilité bidimensionnelle. L'intervalle de variation des deux variables est représenté sur chacun des deux axes de l'histogramme h . La valeur $h(i, j)$ représente la fréquence, en d'autres termes le nombre de particules dans le canal d'indices i et j respectivement sur les axes (OX) et (OY). Un échantillon de 5×10^6 particules a été tiré de chaque espace des phases pour créer huit distributions 2D : $h_{(R,E)}$, $h_{(\theta,\psi)}$, $h_{(E,\delta)}$, $h_{(R,\delta)}$, $h_{(E,\phi)}$, $h_{(R,\phi)}$, $h_{(x,y)}$ et $h_{(\phi,\delta)}$ fig.4.6, 4.7, 4.8, 4.9. De manière similaire 100 sous-intervalles ou canaux sont considérés sur chaque axe.

Les distributions $h_{(x,y)}$ de la position en coordonnées cartésiennes fig.4.6 (a, c, e), montrent une symétrie polaire pour le linac *Elekta Precise*, pour l'accélérateur *Varian TrueBeam* un effet de collimation carrée apparaît. Il est connu que la fluence des photons à la sortie de la cible d'un accélérateur linéaire d'électrons est très intense sur l'axe du faisceau, ce qui n'est pas conforme avec les recommandations cliniques exigeant une fluence aplatie et homogène surtout pour les champs de moyenne et grande taille. L'aplatissement est achevé à travers l'atténuation du faisceau par le cône égalisateur. La quantité c_{FF} que nous avons définie par l'équation 4.5, permet d'estimer l'effet du filtre sur la fluence :

$$c_{FF} = \frac{\sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 h_{(x,y)} \left(\frac{n_{I,x}}{2} + i, \frac{n_{I,y}}{2} + j \right)}{\sum_{i=-1}^1 \sum_{j=-1}^1 h_{(x,y)} (i_{max} + i, j_{max} + j)}, \quad (4.5)$$

i_{max} et j_{max} sont les indices respectifs du canal de fréquence maximale $\max(h_{(x,y)})$. $n_{I,x}$ et $n_{I,y}$ représentent le nombre d'intervalles sur les axes (OX) et (OY) .

Le terme du numérateur traduit la moyenne de neuf fréquences sur l'axe du faisceau, le numérateur indique également la moyenne des fréquences entourant la valeur maximale $\max(h_{(x,y)})$.

Les valeurs approximatives du coefficient c_{FF} pour cet échantillon de 5×10^6 sont 0.75 et 0.73 respectivement pour les faisceaux 6 MV des accélérateurs *Elekta Precise* et *Varian TrueBeam*. Nous ne pouvons pas expliquer cette différence entre les deux linacs pour la même énergie nominale uniquement par la différence au niveau de la géométrie et la composition du filtre égalisateur. Les paramètres de simulation de la source des électrons primaires peuvent influencer la distribution spatiale et donc impacter les valeurs du c_{FF} calculées. Le facteur c_{FF} pour le faisceau 10 MV est de 0.72, ce qui nous indique que le filtre égalisateur utilisé pour cette énergie est probablement différent de celui de l'énergie 6 MV pour le même accélérateur.

L'histogramme $h_{(\theta,\psi)}$ montre clairement que θ est approximativement égale à ψ pour les trois faisceaux de photons fig.4.6 (b, d, f). La distribution de l'angle de diffusion ϕ en fonction de la position radiale est caractérisée par une droite passant par l'origine de l'histogramme. La majorité des particules possède un angle de diffusion qui varie linéairement en fonction de la position fig.4.7. En ce qui concerne les dépendances liées à l'énergie d'une particule, l'allure du spectre de freinage en fonction de la position est conservée, uniquement la statistique amplifie la forme de la distribution. Par contre l'histogramme $h_{(E,\phi)}$ montre que l'énergie de la particule dépend beaucoup plus de l'angle de diffusion que de la position radiale ou bien la différence δ . Nous pouvons remarquer que l'allure du spectre change rapidement lorsque l'angle de diffusion est supérieur à 15° . De plus, l'énergie de la particule décroît rapidement et inversement en fonction de ϕ fig.4.8.

Une triple dépendance entre les variables θ , ψ et E ; θ , ψ et ϕ est étudiée à travers les deux histogrammes $h_{(E,\delta)}$ et $h_{(\phi,\delta)}$. La distribution de δ fluctue autour de la valeur nulle, presque 80% des particules pour les trois faisceaux de photons étudiés ont une valeur $\delta = 0 \pm 5^\circ$. La largeur à mi-hauteur de la distribution de δ diminue en fonction l'énergie et augmente en parallèle avec l'angle de diffusion ϕ fig.4.9.

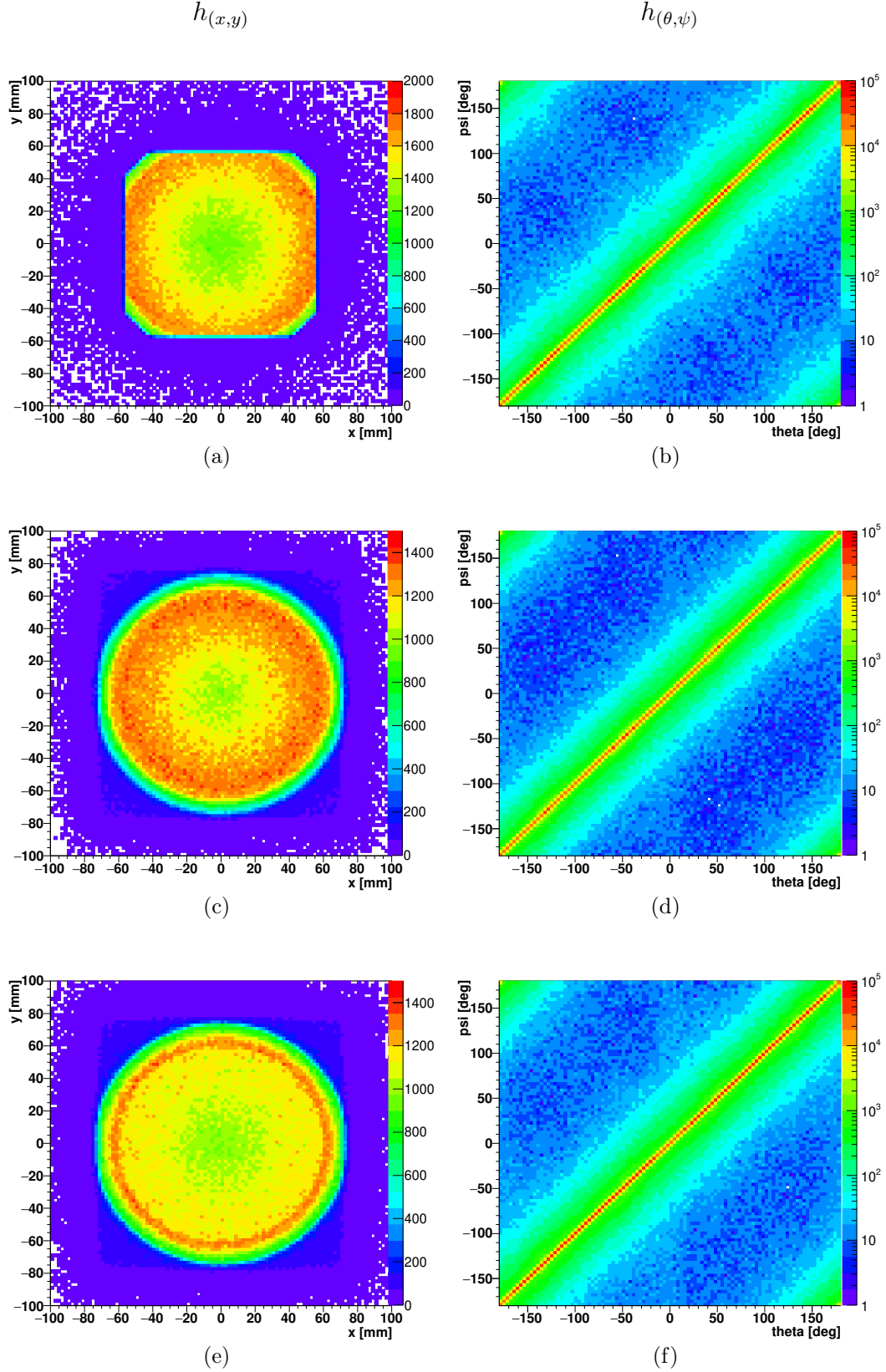


FIGURE 4.6: Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV et (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre les coordonnées cartésiennes x et y des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre les angles θ et ψ des photons de l'espace des phases.

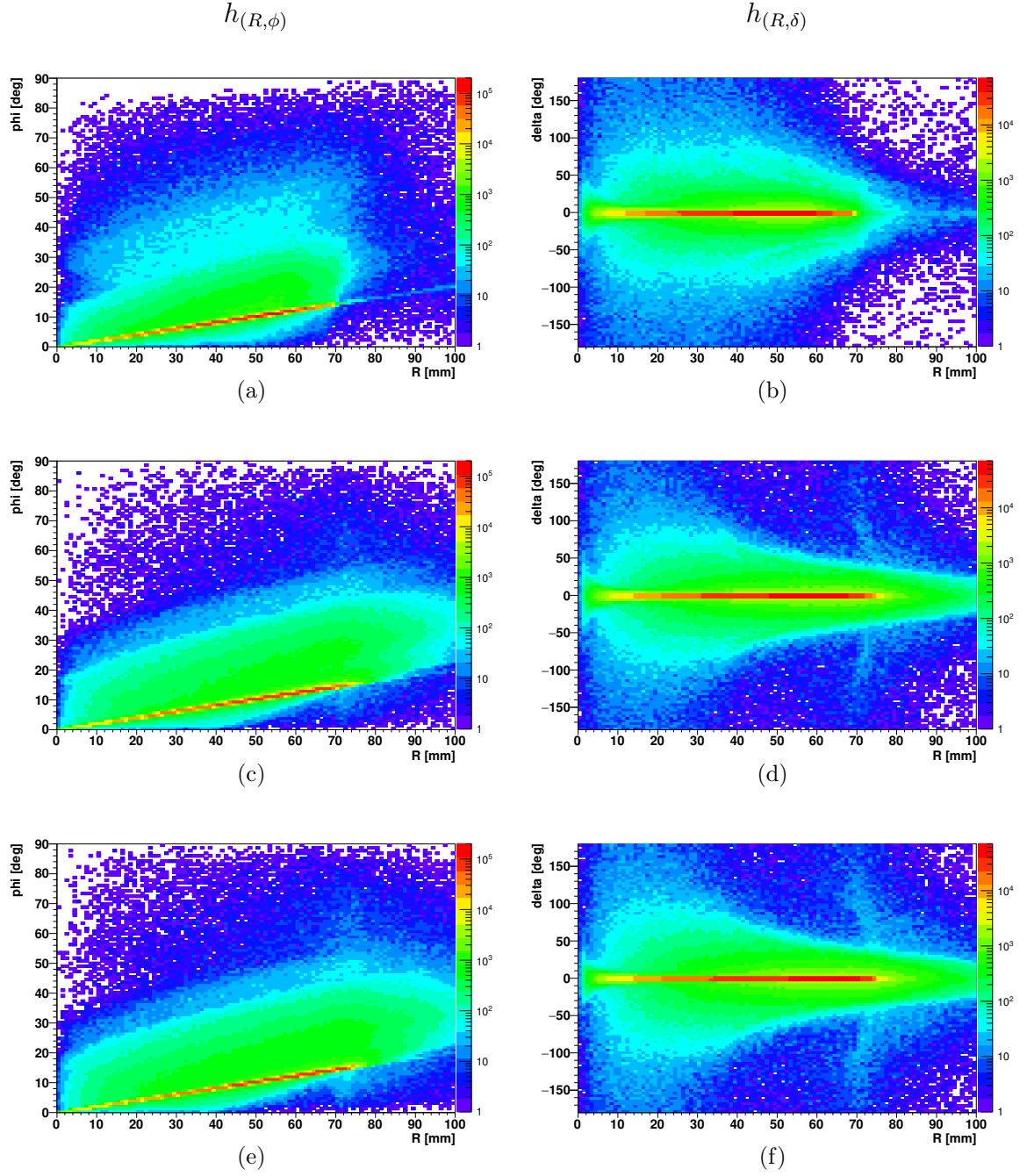


FIGURE 4.7: Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV et (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre la position radiale R et l'angle de diffusion ϕ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre la position radiale R et la différence δ des photons de l'espace des phases.

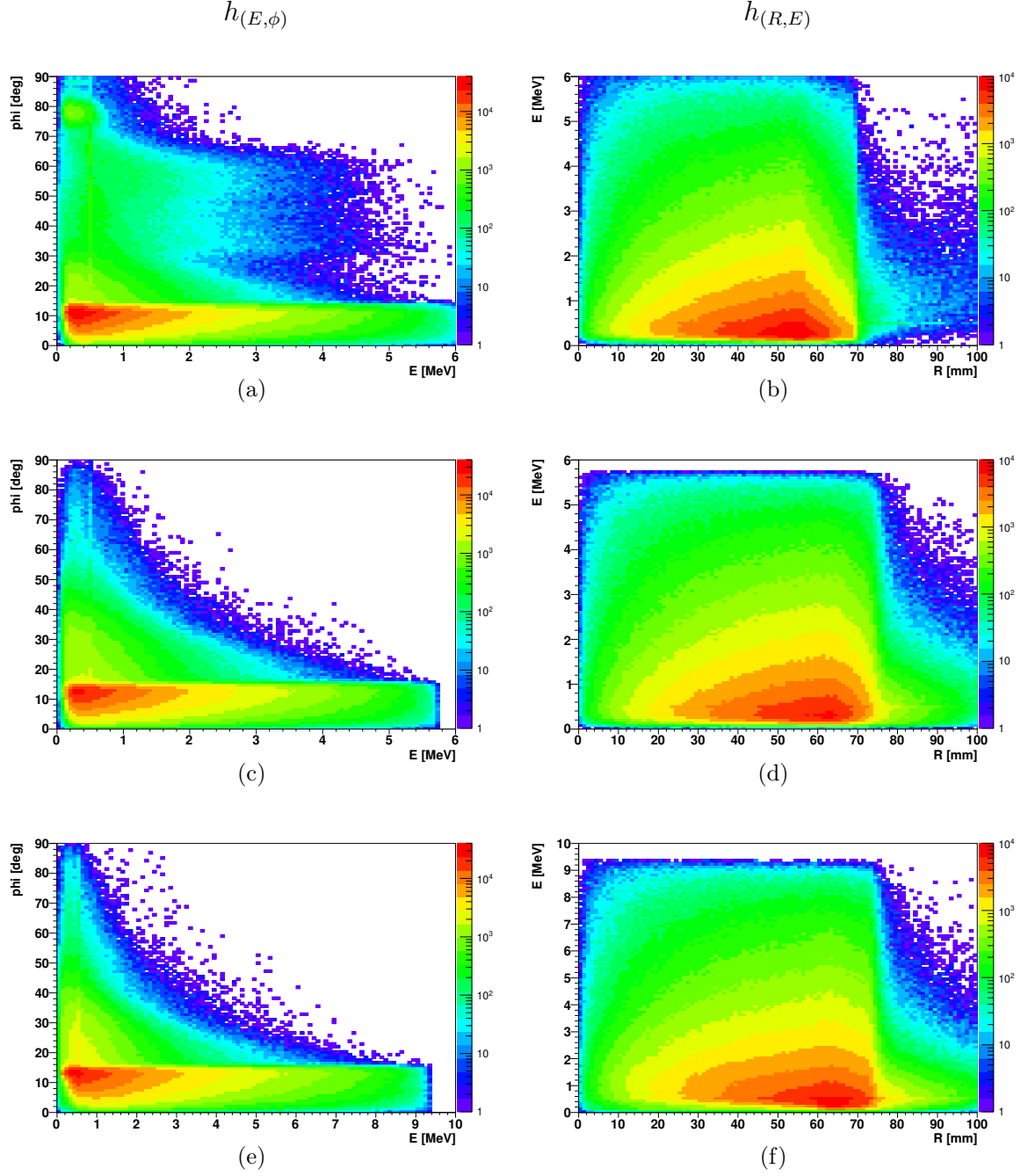


FIGURE 4.8: Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV ; et (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre l'énergie E et l'angle de diffusion ϕ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre la position radiale R et l'énergie E des photons de l'espace des phases.

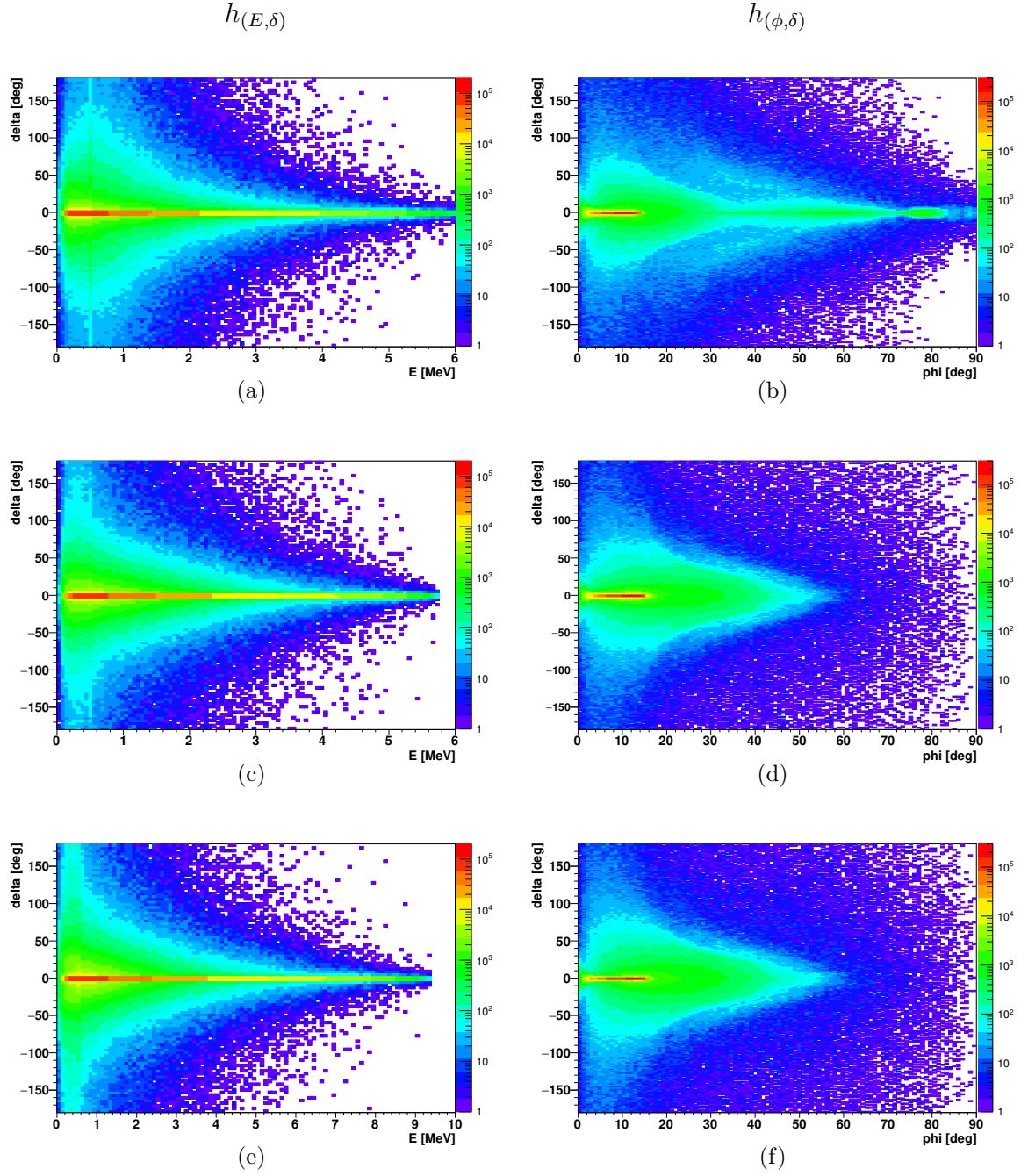


FIGURE 4.9: Représentation de l'espace des phases sous forme d'histogrammes 2D pour trois faisceaux de photons. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV et (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV. (a, c, e) : corrélation entre l'énergie E et δ des photons de l'espace des phases ; (b, d, f) : corrélation entre l'angle de diffusion ϕ et δ des photons de l'espace des phases.

4.2.5 Données d'entrée du modèle à sources virtuelles

Pour générer un événement lors d'une simulation MC le vecteur position, le vecteur direction, l'énergie de la particule et son poids statistique doivent être déterminés avec précision. Dans les sections qui suivent, les particules sont des photons qui ont le même poids statistique. Dans le MSV que nous allons présenter, ces variables sont déterminées par un algorithme de reconstruction dépendant de la source. Les données d'entrée du modèle sont dérivées de deux fichiers fusionnés d'espace des phases contenant les informations brutes relatives aux radiations, occupant un espace mémoire significatif pour chaque faisceau. Ces fichiers d'espace des phases sont convertis en distributions statistiques 1D décrivant l'énergie, les distributions spatiales des deux sources modélisées (rayonnement primaire/rayonnement diffusé) et la direction des particules pour la source de rayonnement diffusé. Les densités de probabilité extraites sont enregistrées dans un fichier ROOT d'environ 800 ko. Le gain estimé en espace mémoire est de l'ordre 1/4718 pour un fichier original du linac *Elekta Precise* occupant 3.6 Go par exemple.

Les espaces des phases de l'AIEA ne contiennent aucune information permettant de distinguer les photons provenant directement de la source, représentés dans le MSV par la source primaire, des photons diffusés par l'une des composantes de la tête d'irradiation du linac. L'analyse des corrélations existantes entre les différentes combinaisons de variables, a montré des régions contenant un très grand nombre de particules que nous pouvons exploiter pour caractériser le faisceau de photon d'un linac médical.

L'histogramme $h_{(R,\phi)}$ a été utilisé pour différencier les photons primaires des photons diffusés. La distribution de la figure 4.7 (a, c, e) montre clairement deux catégories de photons. Le premier groupe est décrit par une fonction linéaire de pente m ; le deuxième groupe montre une distribution statistique étalée qui dépend légèrement de la position radiale. Nous pouvons estimer l'angle de diffusion des photons primaires par l'équation suivante :

$$\phi_i = m.R_i \pm \frac{\sigma_\phi}{2}. \quad (4.6)$$

La pente de l'équation 4.6 est égale à $(0.1995 \pm 0.0002)^\circ.\text{mm}^{-1}$ pour les accélérateurs *Elekta Precise* et *Varian TrueBeam*. La droite en rouge représentant les particules primaires a une largeur quasi-constante en fonction de la position radiale R des particules. La largeur moyenne de la droite est estimée par un fit *gaussien* appliqué aux histogrammes 1D extraits de la distribution 2D $h_{(R,\phi)}$. L'écart type obtenu, $\sigma_\phi = 0.15^\circ$, est utilisé pour estimer la fluctuation de la valeur de l'angle de diffusion ϕ autour de la moyenne. Chaque particule satisfaisant l'inégalité 4.7 est considérée primaire provenant directement de la cible du linac, le reste des particules est considéré diffusé par les autres composantes.

$$m.R_i - \frac{\sigma_\phi}{2} \leq \phi_i \leq m.R_i + \frac{\sigma_\phi}{2} \quad (4.7)$$

En utilisant cette même inégalité nous pouvons déterminer une distribution spatiale bidimensionnelle pour chacune des deux sources virtuelles. Ces distributions 2D seront utilisées pour échantillonner les positions initiales des particules dans l'espace des phases. La pondération obtenue pour chaque composante représente le point de

départ pour ajuster la précision de reconstruction de la fluence pouvant impacter les profils de dose dans la région du build-up.

La forte corrélation entre l'énergie et la direction d'une particule représentée par l'histogramme $h_{(E,\phi)}$, a été mise à profit pour extraire les spectres en énergie du MSV. L'intervalle $[0, \pi/2]$, dans lequel l'angle ϕ varie, est discrétisé en 200 canaux, un spectre énergétique est assigné à chaque subdivision ou canal de largeur $\Delta\phi_i$.

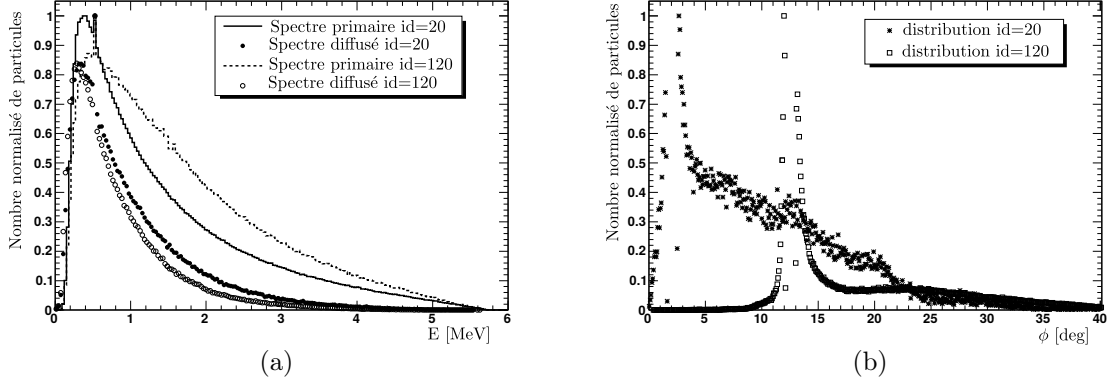


FIGURE 4.10: Exemple des distributions en énergie des deux sources primaire/diffusée et des distributions angulaires normalisées des photons de la source virtuelle de rayonnement diffusé, extraites de l'espace des phases du faisceau *Elekta Precise* 6 MV. (a) : spectres énergétiques d'indice angulaire $i_\phi = \{20, 120\}$; (b) : distribution angulaire des photons diffusés d'indice radial $i_R = \{20, 120\}$.

La pondération de chaque source de rayonnement, en d'autres termes le nombre normalisé de particules émises par chacune des composantes du MSV est principalement déterminée par l'inégalité 4.7. En regardant les histogrammes $h_{(R,\phi)}$, nous remarquons que les particules primaires se situent à l'intérieur d'un disque de rayon maximal R_{max} inférieur à 75 mm pour l'accélérateur *Precise* et 70 mm pour *True-Beam*, cette valeur représente probablement la projection du bord du collimateur primaire sur le plan de l'espace des phases. À base de cette hypothèse nous pouvons estimer l'angle limite de diffusion ϕ_{max} des photons de freinage provenant directement de la cible par la formule :

$$\phi_{max} = \arctan\left(\frac{R_{max}}{d_c}\right) \quad (4.8)$$

$d_c = 279$ mm est la distance entre l'origine de l'espace des phases et la cible de l'accélérateur².

Les valeurs théoriques de ϕ_{max} devraient indiquer 15.05° et 14.08° respectivement pour les accélérateurs *Elekta Precise* et *Varian TrueBeam*, ce qui est tout à fait conforme avec les histogrammes de dépendance $h_{(R,\phi)}$ fig.4.7 (a, c, e).

La table 4.2 montre la contribution obtenue pour chacune des deux sources virtuelles du modèle élaboré. En nous basant sur l'inégalité 4.7, 5×10^6 particules tirées de chaque espace des phases ont été analysées; les valeurs montrées dans cette table

2. Cette constante est mentionnée dans le fichier entête des espaces des phases de l'AIEA.

seront ajustées suite à une comparaison récursive de distribution de dose, par la méthode d'essai-erreur.

TABLE 4.2: Contribution de chaque source virtuelle, déduite de l'analyse de 5×10^6 particules tirées de trois espaces des phases étudiés.

Faisceau	Rayonnement primaire	Rayonnement diffusé
<i>TrueBeam</i> 6 MV	82.5%	17.5%
<i>Precise</i> 6 MV	80.6%	19.4%
<i>Precise</i> 10 MV	78.3%	21.7%

La reconstruction de la source de rayonnement diffusé nécessite une description différente, afin de prendre en considération autant que possible les propriétés aléatoires complexes résultant de la contribution de plusieurs composantes, sources de rayonnement diffusé dans la tête d'irradiation. Pour reconstruire le couple (ψ, ϕ) , 200 histogrammes ont été extraits de la distribution décrivant la variation de ϕ en fonction de la position radiale R . L'angle ψ est déduit de la dépendance entre δ eq.4.2 et l'angle de diffusion ϕ ; 200 distributions 1D de la variable δ sont extraites suivant la même procédure utilisée pour dériver les spectres en énergie.

4.2.6 Algorithme de reconstruction

La procédure de reconstruction du faisceau de photons commence par l'initialisation et le chargement des données nécessaires sous forme de distributions de probabilité corrélées. La contribution de chacune des composantes du MSV dépend de la configuration du linac considéré. L'algorithme de reconstruction se base sur les corrélations entre les différentes variables eq.4.1 définissant un photon émis à partir d'un linac.

Une fonction d'ajustement a été établie eq.4.9 pour modéliser analytiquement la distribution normalisée de la variable δ figs.4.11 et 4.12. Cette fonction peut être utilisée directement pour l'échantillonnage de la variable aléatoire δ . Les paramètres d'ajustement pour les trois faisceaux de photons étudiés sont résumés dans la table 4.3. Les valeurs et les incertitudes correspondantes ont été obtenues par l'algorithme de minimisation implémenté en C++ dans la classe `TMinuit` de la bibliothèque `ROOT` pour l'analyse des données.

$$f(\delta, \mu_i, \sigma_i^2, \nu_i) = \frac{p_3(\delta, \mu_3, \sigma_3^2, \nu_3)}{\sum_{i=1}^2 [p_i(\delta, \mu_{p_i}, \sigma_{p_i}^2, \nu_{p_i}) + g_i(\delta, \mu_{g_i}, \sigma_{g_i}^2)]} \quad (4.9)$$

$$p_i(\delta, \mu_i, \sigma_i^2, \nu_i) = \frac{A_i}{\left(1 + \left(\frac{\delta - \mu_i}{\sigma_i}\right)^2\right)^{\nu_i}} \quad (4.10)$$

$$g_i(\delta, \mu_i, \sigma_i^2) = \frac{A_i}{\sigma_i \cdot \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\delta - \mu_i}{\sigma_i}\right)^2\right) \quad (4.11)$$

La fonction d'ajustement globale eq.4.9 est exprimée principalement en fonction de la distribution de *Pearson VII* au numérateur eq.4.10 décrivant approximative-

ment la densité de probabilité de δ figs.4.11, 4.12 et d'une fonction corrective au dénominateur, constituée d'une sommation de deux distributions de *Pearson VII* et de deux distributions *Gaussiennes* eq.4.11. Les valeurs du χ^2 et du coefficient de détermination R^2 sont données dans la table 4.4.

TABLE 4.3: Paramètres de la fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ figs.4.11 et 4.12 pour les faisceaux des l'accélérateur *Varian TrueBeam* et *Elekta Precise*.

	$A_i \pm \Delta A_i$	$(\mu_i \pm \Delta\mu_i)^\circ$	$(\sigma_i \pm \Delta\sigma_i)^\circ$	$\nu_i \pm \Delta\nu_i$
<i>Varian TrueBeam</i> 6 MV				
p_1	0.481 ± 0.002	1.221 ± 0.004	1.601 ± 0.004	0.748 ± 0.002
p_2	0.481 ± 0.002	-1.221 ± 0.004	1.601 ± 0.004	0.748 ± 0.002
p_3	0.955 ± 0.001	0 ± 0.001	1.032 ± 0.001	1.763 ± 0.002
g_1	$(0.172 \pm 0.001)^\circ$	0 ± 0.007	0.503 ± 0.006	—
g_2	$(5.002 \pm 0.001)^\circ$	0 ± 0.005	20.0 ± 10.5	—
<i>Elekta Precise</i> 6 MV				
p_1	0.901 ± 0.002	2.198 ± 0.004	1.659 ± 0.004	0.758 ± 0.002
p_2	0.901 ± 0.002	-2.120 ± 0.004	1.660 ± 0.004	0.758 ± 0.002
p_3	0.953 ± 0.001	0 ± 0.001	1.113 ± 0.001	1.524 ± 0.002
g_1	$(0.108 \pm 0.001)^\circ$	0 ± 0.007	0.412 ± 0.006	—
g_2	$(0.170 \pm 0.001)^\circ$	0 ± 0.005	130.0 ± 10.5	—
<i>Elekta Precise</i> 10 MV				
p_1	0.951 ± 0.002	2.302 ± 0.004	1.606 ± 0.004	0.794 ± 0.002
p_2	0.951 ± 0.002	-2.302 ± 0.004	1.606 ± 0.004	0.794 ± 0.002
p_3	0.951 ± 0.05	0 ± 0.01	1.013 ± 0.014	1.8 ± 0.1
g_1	$(0.17 \pm 0.01)^\circ$	0 ± 0.007	0.501 ± 0.006	—
g_2	$(5 \pm 0.001)^\circ$	0 ± 0.005	130.0 ± 10.5	—

TABLE 4.4: Évaluation de la qualité d'ajustement de la distribution de δ , par le calcul du χ^2 et du coefficient de détermination R^2 .

	<i>TrueBeam</i> 6 MV	<i>Precise</i> 10 MV	<i>Precise</i> 6 MV
χ^2	0.006	0.001	0.001
R^2	99%	99%	99%

4.2.6.1 Source de rayonnement primaire

Les photons primaires du rayonnement de freinage présents dans l'espace des phases, sont considérés directement émis par une source focale de petite dimension. Une densité de probabilité bidimensionnelle *Gaussienne* notée $G_s(x_s, y_s | \mu_x, \mu_y, \sigma_s^2)$ eq.4.12 est attribuée à la distribution spatiale des photons de la source primaire. σ_s est un paramètre important contrôlant l'effet de la pénombre et la variation de la fluence au centre du faisceau [Tian et al. \(2015\)](#). En partant de cette hypothèse, le vecteur direction d'émission $\vec{D}$ paramétré par le couple (ψ, ϕ) fig.4.1, est calculé en fonction des coordonnées (x_s, y_s, z_s) du point source échantillonné de la distribution *Gaussienne*

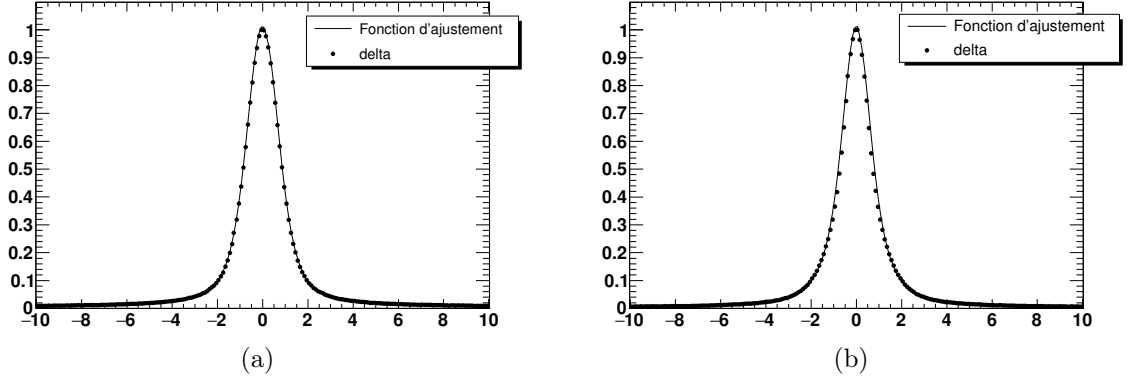


FIGURE 4.11: Fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ pour l'accélérateur *Elekta Precise*. (a) : faisceau 6 MV ; (b) : faisceau 10 MV.

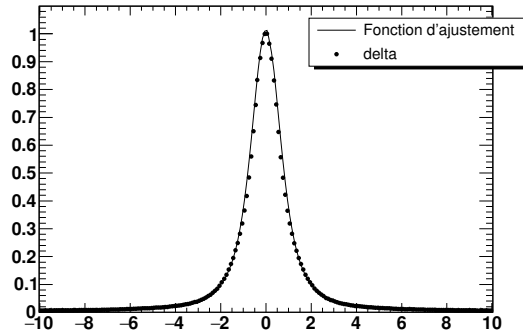


FIGURE 4.12: Fonction d'ajustement eq.4.9 de la distribution δ pour le faisceau 6 MV de l'accélérateur *Varian TrueBeam*.

2D eq.4.12 et des coordonnées $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$ échantillonnées de la composante primaire de la distribution spatiale de l'espace des phases.

$$G_s(x, y | \mu_x, \mu_y, \sigma_s^2) = \frac{1}{\sigma_s \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{(x - \mu_x)^2 + (y - \mu_y)^2}{2\sigma_s^2} \right) \quad (4.12)$$

μ_x, μ_y : les valeurs moyennes de la distribution $G_s(x, y)$ selon les axes (OX) et (OY) .
 σ_s : Dimension fictive de la source primaire fig.4.1.

z_{phsp} est une constante pour l'espace des phases de l'accélérateur *Elekta Precise*, indiquant sa position selon l'axe (OZ) . Cependant, l'espace des phases de l'accélérateur *Varian TrueBeam* est de forme concave selon l'axe (OX) . z_{phsp} est calculée dans ce cas par l'équation suivante :

$$z_{phsp} = \sqrt{r^2 - x_{phsp}^2} - c \quad (4.13)$$

$r = 529.41$ mm est le rayon de courbure de l'espace des phases utilisé.

$c = 256$ mm est une constante.

L'angle de diffusion ϕ est calculé en fonction des coordonnées cartésiennes du point d'émission (x_s, y_s, z_s) , échantillonné de la distribution *gaussienne* et du point d'im-

fact du photon avec l'espace des phases $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$ fig.4.1. Un tirage aléatoire de l'énergie du photon est effectué de l'une des 200 distributions 1D corrélées avec l'angle de diffusion fig.4.10 (a). L'indice du spectre en énergie est déterminé en fonction de ϕ et de la largeur du canal $\Delta\phi_i$.

4.2.6.2 Source de rayonnement diffusé

La direction d'une particule est une variable essentielle pour assurer une reconstruction fidèle de la composante de rayonnement diffusé par différents éléments dans la tête d'irradiation d'un accélérateur linéaire médical. La direction dans ce MSV est décrite par 400 distributions 1D, traduisant la corrélation entre la direction et la position d'une particule, dérivées respectivement des histogrammes 2D $h_{(R,\phi)}$ et $h_{(\phi,\delta)}$.

La direction des photons diffusés, décrite par l'histogramme montrant la corrélation entre ϕ et R fig.4.7 (a, c, e), est aléatoirement distribuée comparée à la répartition des photons primaires se caractérisant par un aspect déterministe modélisé dans ce travail par une fonction linéaire eq.4.6. Nous pouvons noter que la densité de probabilité de ϕ en fonction de R pour les photons diffusés, a la même répartition décalée d'une valeur calculée par l'équation 4.6 pour chaque subdivision radiale.

Une légère différence est observée dans les intervalles $R \leq 10$ mm et $R \geq 80$ mm comparés au reste, peut être justifiée par le faible nombre de particules sur les anneaux à proximité du centre et aussi par l'effet du collimateur primaire réduisant la statistique sur les bords de l'espace des phases fig.4.7 (a, c, e).

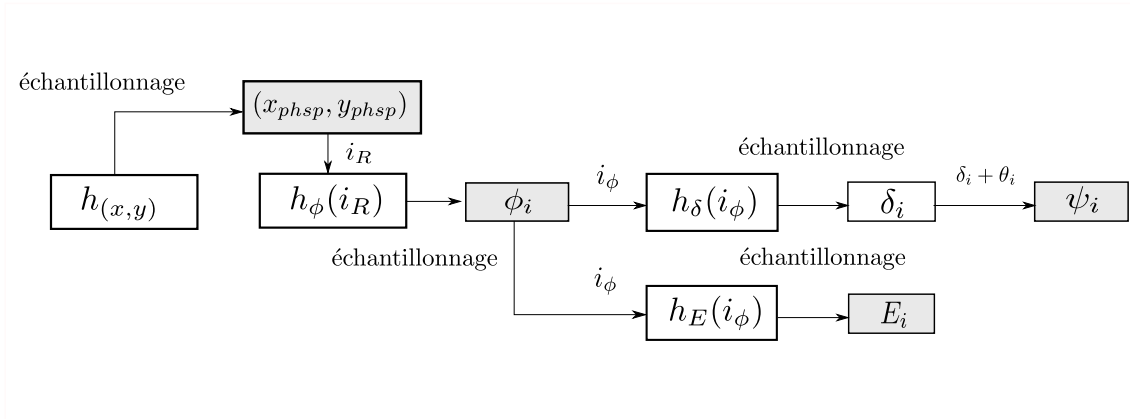


FIGURE 4.13: Méthode d'échantillonnage d'une particule à partir de la source virtuelle de rayonnement diffusé. i_R et i_ϕ sont les indices correspondants aux distributions 1D de l'angle de diffusion et de l'énergie respectivement h_ϕ et h_E .

L'angle de diffusion ϕ d'un photon est tiré d'une distribution statistique définie par un indice radial i_R fig.4.13. Cet indice est déduit de la position R , calculée après l'échantillonnage de la position initiale à partir de la distribution spatiale 2D des photons diffusés et de la largeur de la subdivision radiale ΔR eq.4.3.

Le deuxième angle de direction ψ , est calculé par l'équation 4.2. La valeur moyenne de δ est toujours centrée sur 0 pour toutes les distributions montrant la dépendance entre δ et la position, la direction ou l'énergie d'une particule, respectivement

notées $h_{(\phi,\delta)}$, $h_{(R,\delta)}$ et $h_{(E,\delta)}$. Une fois la valeur de ϕ déterminée, la distribution 1D de la variable δ est définie suivant les mêmes considérations décrites précédemment. Chaque distribution 1D correspond à une subdivision de largeur Δx_i eq.4.3. $x_i \in [x_{min}, x_{max}]$ est l'une des variables R ou ϕ .

Il est important de noter que le nombre de distributions n_I utilisé pour échantillonner les variables a une influence sur la qualité de reconstruction. Une valeur optimale permettra à la fois de limiter la taille du fichier de données d'entrée et de conserver la précision du MSV.

L'énergie d'un photon diffusé est également corrélée avec l'angle de diffusion ϕ qui joue un rôle central dans le formalisme du modèle. L'angle de diffusion déterminera l'indice angulaire i_ϕ du spectre en énergie 1D utilisé pour l'échantillonnage fig.4.10. Le processus de reconstruction est résumé dans la figure 4.13.

4.2.7 Développement du MSV sous le code Geant4-[mt]

Une classe $\mathbf{C^{++}}$ a été spécialement développée pour permettre une intégration fluide du MSV dans notre code de simulation basé sur **Geant4-[mt]**. La classe contient principalement les fonctions suivantes :

1. **load()** : à travers cette fonction les données d'entrée du modèle, pour chacune des deux sources virtuelles, sont chargées sur la mémoire vive de la station de calcul. Il s'agit de deux distributions spatiales 2D $h_{(x,y)}$, d'un vecteur de spectres en énergie $h_{E,i=\{1,2...200\}}$ corrélés à l'angle de diffusion ϕ , d'un vecteur de distributions $h_{\phi,i=\{1,2...200\}}$ de l'angle ϕ corrélées à la position radiale R et d'un vecteur de distributions $h_{\delta,i=\{1,2...200\}}$ corrélées à l'angle de diffusion ϕ .
2. **get_particle()** : cette fonction représente l'algorithme de reconstruction abordé dans la sous-section 4.2.6 précédente. Le processus commence par le tirage aléatoire du type de la particule. Un échantillonnage stochastique d'une variable aléatoire ζ uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$ permettra de définir le type de la source virtuelle. Soit R_p la contribution de la source de rayonnement primaire, si une valeur échantillonnée $\zeta \leq R_p$, ceci indique que la particule est émise à partir de la source virtuelle de rayonnement primaire, sinon elle sera considérée comme particule de la source virtuelle de rayonnement diffusé. Le traitement suivi pour le photon en phase de reconstruction dépendra du type de source virtuelle. Pour chaque particule reconstruite la fonction calcule la position en coordonnées cylindriques (R, θ, z) , la direction en fonction du couple d'angle (ψ, ϕ) et l'énergie E .
3. **index()** : sur la base des corrélations qui existent entre les différentes variables, cette fonction permet d'identifier l'indice de l'histogramme correspondant à la particule reconstruite.
4. Une fonction libérant l'espace mémoire occupé par tout objet $\mathbf{C^{++}}$ instancié par la fonction **load()**.

La fonction **GeneratePrimaries()** faisant partie de la classe génératrice d'événements primaires, dérivée de la classe de base **G4VUserPrimaryGeneratorAction()**, fera appel à la méthode **get_particle()** durant la boucle de simulations pour générer les particules primaires.

4.2.8 Modélisation du collimateur secondaire et calcul de dose dans l'eau avec Geant4-[mt]

4.2.8.1 Collimateur secondaire

Un collimateur secondaire basique, composé de deux mâchoires X/Y est positionné, dans notre modèle, en dessous de l'espace des phases. Les mâchoires sont modélisées par deux paires en formes de boîtes en Tungstène de 7 cm d'épaisseur. Tous les calculs MC effectués dans cette partie sont réalisés avec le même collimateur fig.4.14. Une trajectoire curviligne du mouvement des mâchoires a été adoptée pour mieux suivre la divergence du faisceau. La distance entre la position de la cible et le centre d'une mâchoire représente le rayon de courbure d'un cercle fictif, dont le centre est confondu à celui de la cible.

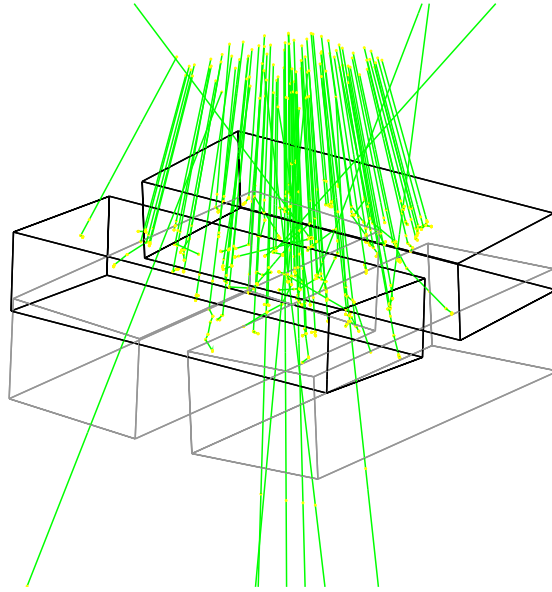


FIGURE 4.14: Visualisation OpenGL du collimateur secondaire modélisé. La dimension du champ d'irradiation à l'isoscentre est $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

Nous considérons que les mâchoires sont en Tungstène ($\rho_W = 15 \text{ g.cm}^{-3}$) [Kądziołka et al. \(2006\)](#), [Hariri & Shahriari \(2010\)](#). Un seuil de production de particules secondaires égal à 1 cm est assigné aux photons, électrons et positrons dans la région du collimateur. Cette valeur est convertie par le noyau de **Geant4** en énergie seuil de production de particules secondaires, qui dépendra du type de la particule, et de la densité du milieu traversé. Une particule secondaire n'est produite que lorsque sa portée dans le milieu est strictement supérieure à la distance de coupure, ce qui permet d'optimiser le temps de calcul puisque la majorité des particules sont absorbées dans les mâchoires du collimateur.

4.2.8.2 Calcul de dose dans l'eau

Pour évaluer la précision et l'efficacité du MSV présenté, les distributions de dose dans l'eau du faisceau reconstruit sont comparées avec les distributions de dose de

référence calculées avec les espaces des phases de l'AIEA. Le fantôme d'eau cubique utilisé est de dimensions $48.3 \times 48.3 \times 30 \text{ cm}^3$, voxelisé selon les trois axes (OX), (OY) et (OZ) ; une matrice tridimensionnelle de dose est discrétisée en voxels élémentaires de $3 \times 3 \times 3 \text{ mm}^3$. Cependant, une transformation de la taille du voxel a été effectuée pour diminuer les fluctuations statistiques, un volume de $15 \times 15 \times 3 \text{ mm}^3$ a été adopté pour les courbes de rendement en profondeur et $15 \times 3 \times 15 \text{ mm}^3$ pour les courbes de profils de dose. Chaque point représente le dépôt de dose dans un volume sensible de 0.675 cm^3 . Le package de processus physiques électromagnétiques option 3 (`G4EmStandardPhysics_option3`) de `Geant4` est le plus adapté pour la gamme d'énergie simulée. Le seuil de production de particules secondaires pour les photons, électrons et positrons dans l'eau est fixé à 1 mm.

Une comparaison intensive entre les distributions de dose obtenues par le biais du MSV et par les espaces des phases de l'AIEA correspondants a été effectuée à travers le calcul des paramètres d'évaluation dosimétriques telles que la DTA dans les régions à fort gradient de dose et le γ_{index} suivant le formalisme proposé par *Low et al* [Low et al. \(1998\)](#).

Le γ_{index} est un indicateur cherchant la distance Euclidienne minimale Γ entre le point de référence et la distribution évaluée dans l'espace dose distance. La distribution d'évaluation passe le critère γ_{index} au point de référence en question lorsque au moins l'un de ses points satisfait la condition $\Gamma < 1$, des détails supplémentaires sont disponibles dans la section l'annexe [A](#).

4.2.8.3 Espace des phases de l'AIEA et Geant4-[mt]

La manipulation et l'utilisation des espaces des phases de l'AIEA se fait par un ensemble de fonctions écrites en langage C, disponibles également en version `FORTRAN`, permettant de lire et générer un espace des phases selon la norme standard de l'AIEA. Une implémentation `C++` visant à faciliter l'usage et la compatibilité des espaces des phases de l'AIEA avec le code `Geant4` séquentiel a été publiée [Cortés-Giraldo et al. \(2012\)](#).

Dans ce travail, une classe `C++` adaptée au `multi-threading`, permettant de lire un fichier espace des phases pour générer les particules, a été développée. Le code de cette interface est basé principalement sur les fonctions suivantes :

- `iaea_new_source(...)` : permet de créer une instance pour lire les informations descriptives du fichier entête de l'espace des phases.
- `iaea_get_max_particles(...)` : permet d'extraire le nombre maximal de particules contenues dans l'espace des phases codé sur 64 octets.
- `iaea_destroy_source(...)` : permet de fermer les fichiers ouverts et libère l'espace mémoire occupé pendant l'utilisation de l'espace des phases.

Dans le cas de l'exécution parallèle le code d'une classe `C++` devrait prendre en considération la notion `thread safety`. C'est une propriété essentielle dans le cadre de la programmation en mode `multi-threading`, permettant d'assurer un fonctionnement correct du code lorsqu'il est exécuté par plusieurs `threads` et d'éviter les interférences pouvant se déclencher.

4.2.8.4 Efficacité du calcul

Les simulations MC effectuées dans ce travail, ont été exécutées sur une station de calcul, avec un processeur Intel Xeon et une mémoire vive de 12 Go.

Le nombre maximal et optimal d'applications parallèles (**threads**) est déterminé pour atteindre la vitesse maximale d'exécution. Pour estimer le gain en termes de temps d'exécution, le nombre d'événement traité par unité de temps en mode séquentiel est comparé avec celui du mode **multi-thread**.

4.3 Résultats

Le processus de validation adopté, est divisé en deux parties principales. La première partie concerne l'évaluation de la précision de la reconstruction des faisceaux de photons étudiés. La deuxième partie est focalisée sur l'analyse des distributions de dose obtenues par le MSV élaboré.

La pondération de chaque source virtuelle (rayonnement primaire/rayonnement diffusé) est ajustée par un processus d'essai-erreur. Une évaluation des courbes de rendement en profondeur et des profils de dose dans la région du build-up a été effectuée. Un grand champ d'irradiation a été considéré pour tester la précision du modèle sur l'axe ainsi que sur les bords de l'espace des phases. Un accord satisfaisant a été obtenu pour 60%/40%, pourcentages respectifs du rayonnement primaire et du rayonnement diffusé pour l'accélérateur *Elekta Precise* et 55%/45% pour l'accélérateur *Varian TrueBeam*.

4.3.1 Évaluation de l'algorithme de reconstruction

La validation du MSV passe par la vérification de la conservation des corrélations entre les différentes variables caractérisant et décrivant l'espace des phases. Pour faciliter l'évaluation et la comparaison, l'espace des phases reconstruit par le MSV et l'espace des phases de l'AIEA, sont représentés sous forme de six distributions 2D tab.4.5. L'histogramme de différence absolue normalisée à la valeur maximale de l'espace des phases de référence, est calculé pour chaque couple de variable :

$$h_{\text{diff}}(i, j) = \left| \frac{h_{\text{MSV}}(i, j) - h_{\text{AIEA}}(i, j)}{\max(h_{\text{AIEA}})} \right| \quad (4.14)$$

$h_{\text{diff}}(i, j)$ fréquence du canal d'indice i et j .

h_{MSV} , h_{AIEA} sont respectivement les histogrammes du MSV et de l'AIEA.

Les histogrammes comparés sont calculés à l'isocentre pour évaluer la précision de la reconstruction à la surface du fantôme d'eau utilisé pour le calcul de dose. R_{iso} représente la projection de la coordonnée de position polaire R fig.4.1 sur le plan perpendiculaire au faisceau passant par l'isocentre.

Nous pouvons noter que les histogrammes $h_{(R_{iso}, E)}$, $h_{(\theta, \psi)}$, $h_{(E, \delta)}$ et $h_{(R_{iso}, \delta)}$ utilisés pour la validation, ne font pas partie des corrélations sur lesquelles le formalisme

du modèle est basé, ce qui permet de tester rigoureusement les capacités du MSV proposé.

Les résultats des histogrammes de différence normalisée eq.4.14 sont analysés à travers le calcul du pourcentage d'éléments dans chaque histogramme résiduel inférieur ou égale à trois niveaux croissants de tolérance, 3%, 5% et 10%. Cette procédure permet d'exprimer la conservation des corrélations entre les différentes combinaisons de variables en termes de pourcentage de canaux avec une fréquence en dessous d'une limite d'évaluation.

TABLE 4.5: Analyse des histogrammes de différence normalisée calculés à l'isocentre. Le pourcentage de canaux inférieurs à 3%, 5% et 10% est calculé pour chaque combinaison. (*) *Varian TrueBeam* 6 MV ; (**) *Elekta Precise* 6 MV ; (***) *Elekta Precise* 10 MV.

Faisceau	précision	$h_{\text{diff}} [\%]$					
		(R_{iso}, E)	(θ, ψ)	(E, δ)	(R_{iso}, δ)	(E, ϕ)	(R_{iso}, ϕ)
TB6(*)	$\leq 3\%$	95.5	99.2	99.9	99.6	99.2	99.8
	$\leq 5\%$	98.1	99.2	99.9	99.9	99.9	99.9
	$\leq 10\%$	99.9	99.7	99.9	100.0	99.9	99.9
P6(**)	$\leq 3\%$	93.9	99.1	99.7	99.5	99.1	99.8
	$\leq 5\%$	97.9	99.1	99.8	99.5	99.7	99.8
	$\leq 10\%$	99.7	99.1	99.9	99.9	99.9	99.9
P10(***)	$\leq 3\%$	95.5	99.2	99.8	99.5	99.2	99.8
	$\leq 5\%$	98.7	99.1	99.8	99.9	99.7	99.9
	$\leq 10\%$	99.9	99.7	99.9	99.9	99.9	99.9

Les résultats de la table 4.5 montrent que le pourcentage d'éléments de l'histogramme résiduel eq.4.14, inférieur à 5% dépasse 97% pour l'ensemble des trois faisceaux étudiés. En réduisant la tolérance à 3%, nous observons que toutes les distributions évaluées ont atteint un pourcentage de 99%, à l'exception de l'histogramme de corrélation entre l'énergie et la position radiale $h_{(R_{\text{iso}}, E)}$, pour lequel le pourcentage est approximativement 94%. Pour le dernier niveau 10%, la totalité des distributions 2D montrent un pourcentage supérieur à 99%.

Généralement, les résultats obtenus tab.4.5 confirment une bonne reproductibilité des corrélations directement impliquées dans le formalisme du MSV ($h_{(R_{\text{iso}}, \phi)}$ et $h_{(E, \phi)}$ tab.4.5). La précision pour le reste des combinaisons est satisfaisante et suffisante pour les faisceaux de photons considérés.

La figure 4.15 montre les histogrammes résiduels analysés dans la table 4.5 pour le faisceau 6 MV de l'accélérateur *Elekta Precise*. Nous remarquons que les distributions résultantes sont quasi-nulles, à l'exception d'un faible pourcentage de points dont la différence absolue normalisée dépasse la limite de 5%. Ces points sont particulièrement observés dans la gamme d'énergie inférieure à 500 keV. En se basant sur l'analyse quantitative de la table 4.5 et puisque l'énergie moyenne du faisceau de photons est de l'ordre de 1.3 MeV, nous estimons que l'effet de cette différence est négligeable sur les courbes de distributions de dose.

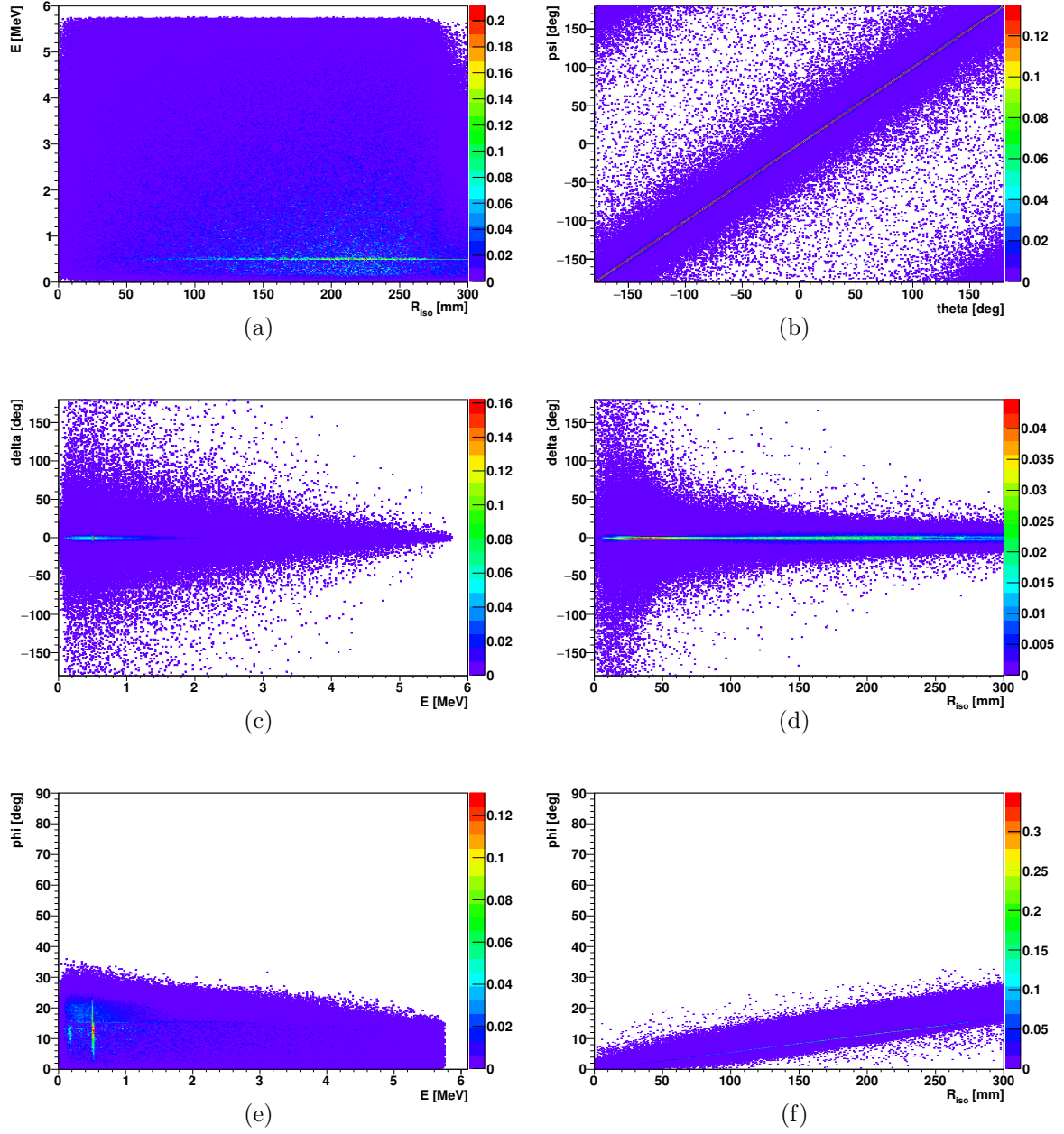


FIGURE 4.15: Évaluation de la qualité de reconstruction du faisceau 6 MV du *linac Elekta Precise* par calcul des histogrammes résiduels eq.4.14. (a) : résidu de la corrélation entre la position radiale et l'énergie; (b) : résidu de la corrélation entre l'angle de position θ et l'angle de direction planaire ψ ; (c) : résidu de la corrélation entre l'énergie et δ ; (d) : résidu de la corrélation entre la position radiale et δ ; (e) : résidu de la corrélation entre l'énergie et l'angle de direction ϕ ; (f) : résidu de la corrélation entre la position radiale et l'angle de direction ϕ .

4.3.2 Validation du calcul de dose

4.3.2.1 Précision du calcul de dose

La validation du calcul de dose évalue la précision du MSV en fonction de l'énergie nominale et en fonction de la taille du champ d'irradiation. Quatre tailles de champs d'irradiation sont considérées, trois de forme carrée de différentes tailles et un champ rectangulaire asymétrique pour évaluer la performance du modèle.

TABLE 4.6: Analyse γ_{index} des courbes de profil de dose $P^{(*)}$ à d_{max} , 10 cm et 20 cm de profondeur et du rendement en profondeur $R^{(**)}$ sur l'axe du faisceau. Le pourcentage de points passant les critères 3%/3 mm et 2%/3 mm est calculé pour chaque champ d'irradiation et énergie de faisceau.

		$30 \times 30 \text{ cm}^2$	$20 \times 7 \text{ cm}^2$	$10 \times 10 \text{ cm}^2$	$3 \times 3 \text{ cm}^2$
<i>Varian TrueBeam 6 MV</i>					
$P^{(*)} z_i = d_{max}$	3%/3 mm	100.0	99.4	98.7	99.4
	2%/3 mm	96.3	97.5	98.1	99.4
$P^{(*)} z_i = 10 \text{ cm}$	3%/3 mm	98.7	100.0	99.4	100.0
	2%/3 mm	96.9	97.5	98.7	98.7
$P^{(*)} z_i = 20 \text{ cm}$	3%/3 mm	100.0	98.1	99.4	100.0
	2%/3 mm	96.3	91.3	98.1	98.7
$R^{(**)}$	3%/3 mm	99.0	100.0	99.0	99.0
	2%/3 mm	99.0	98.0	99.0	98.0
<i>Elekta Precise 6 MV</i>					
$P^{(*)} z_i = d_{max}$	3%/3 mm	100.0	100.0	100.0	100.0
	2%/3 mm	98.1	95.0	100.0	100.0
$P^{(*)} z_i = 10 \text{ cm}$	3%/3 mm	100.0	100.0	99.4	100.0
	2%/3 mm	96.9	97.5	98.7	99.4
$P^{(*)} z_i = 20 \text{ cm}$	3%/3 mm	100.0	100.0	100.0	100.0
	2%/3 mm	97.5	95.6	99.4	100.0
$R^{(**)}$	3%/3 mm	99.0	100.0	100.0	100.0
	2%/3 mm	99.0	97.0	98.0	98.0
<i>Elekta Precise 10 MV</i>					
$P^{(*)} z_i = d_{max}$	3%/3 mm	100.0	99.4	99.4	100.0
	2%/3 mm	99.4	98.2	99.4	100.0
$P^{(*)} z_i = 10 \text{ cm}$	3%/3 mm	100.0	99.4	98.7	100.0
	2%/3 mm	97.5	98.7	98.7	99.4
$P^{(*)} z_i = 20 \text{ cm}$	3%/3 mm	100.0	99.4	100.0	100.0
	2%/3mm	98.7	95.6	100.0	100.0
$R^{(**)}$	3%/3 mm	100.0	99.0	100.0	99.0
	2%/3 mm	100.0	96.0	99.0	97.0

Les courbes de rendements en profondeur et profils de dose aux profondeurs de dépôt maximal d'énergie d_{max} , 10 cm et 20 cm sont tracées sur les figures 4.16, 4.17 comportant les distributions du MSV et des espaces des phases de l'AIEA. Le

γ_{index} et la DTA sont les outils de comparaison utilisés pour analyser la précision du modèle.

L'analyse γ_{index} des courbes de rendement en profondeur sur l'axe central du faisceau ont montré qu'au moins 96% et 95% des points ont passé les critères 3%/3 mm et 2%/3 mm. La même analyse a été effectuée pour les courbes de profile de dose, un pourcentage moyen supérieur à 99% a été obtenu pour le critère 3%/3 mm et 98% pour le 2%/3 mm, quasi-constant à toutes les profondeurs testées. Une bonne précision du calcul à d_{max} est observée, dans cette zone la variation de la fluence de particules est importante. Plus de 98% des points ont passé le critère $\gamma_{3\%/3\text{ mm}}$ et plus de 95% ont un $\gamma_{2\%/3\text{ mm}} < 1$ tab.4.6.

Concernant l'effet de la taille du champ d'irradiation, les résultats de l'analyse $\gamma_{3\%/3\text{ mm}}$ n'ont montré aucune influence notable tab.4.6. Cependant, la précision est légèrement impactée pour le critère $\gamma_{2\%/3\text{ mm}}$ comparé à la norme d'évaluation standard acceptable $\gamma_{3\%/3\text{ mm}}$ largement utilisée cliniquement. Le pourcentage minimal de points passant le test pour les courbes de profiles de dose a été observé dans le cas du champ rectangulaire asymétrique de l'accélérateur linéaire *Varian TrueBeam* pour l'énergie nominale 6 MV, à une profondeur de 20 cm tab.4.6. Nous pouvons noter que les points qui ont échoué au test du $\gamma_{2\%/3\text{ mm}}$, pour ce champ particulier, sont localisés à l'intérieur du champ d'irradiation à la limite de la pénombre fig.4.17 (c). Ce résultat peut être amélioré par ajustement du paramètre σ_s , dimension fictive de la source primaire du MSV eq.4.12.

En ce qui concerne l'effet de l'énergie du faisceau, le MSV montre une stabilité de précision pour le critère 3%/3 mm. Le taux de réussite varie de 98% à 100% pour le faisceau 6 MV comme pour le faisceau 10 MV. La dispersion des valeurs augmente pour le critère 2%/3 mm, elles sont comprises entre 91% et 100% pour le 6 MV ; cependant, pour le faisceau 10 MV l'intervalle de variation s'étend de 95% à 100% tab.4.6.

La précision du MSV dans les régions à fort gradient de dose est évaluée en utilisant le concept de *distance to agreement* DTA Van Dyk et al. (1993), il s'agit notamment de la région du *build-up* d'une courbe de rendement en profondeur et de la région de pénombre d'une courbe de profile de dose. La DTA est la distance horizontale séparant la distribution de dose de référence de la distribution de dose évaluée, dans l'espace dose distance Low (2010). En pratique, la DTA est définie par la distance entre le point évalué et le point de référence le plus proche ayant la même valeur de dose. Pour utiliser cet outil, la pénombre et la région du *build-up* sont discrétisées en 20 points équidistants ; les DTA minimales, maximales et moyennes sont calculées pour chaque champ d'irradiation.

La distance 3 mm séparant deux points successives représente la taille du voxel maintenue constante pour les profiles et les rendements en profondeur. Une interpolation linéaire entre les points de chaque courbe, dans la région considérée, a été effectuée pour ajouter d'autres points additionnels séparés par un pas élémentaire dont la valeur dépend de la largeur de la région analysée. Il est important de noter que la largeur de la région du *build-up*, distance entre la surface du fantôme et la profondeur du dépôt maximal de dose, augmente en fonction de l'énergie du faisceau Mayles et al. (2007), donc le pas utilisé équivaut à 0.75 mm pour le 6 MV et

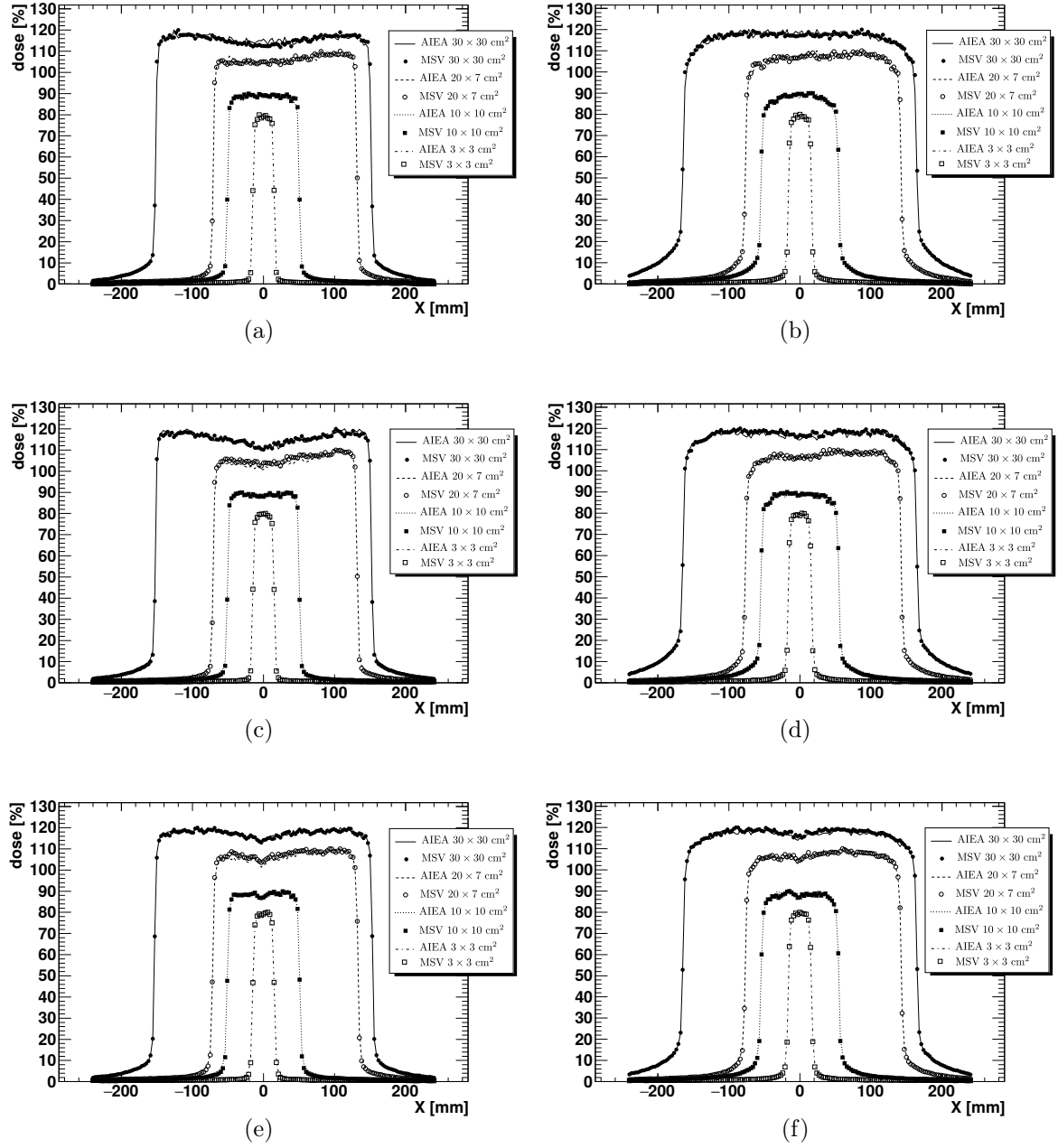


FIGURE 4.16: Comparaison entre les profils de dose dans l'eau du MSV et de l'espace des phases calculés à d_{max} et 10 cm, pour les champs $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 7 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV. (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV.

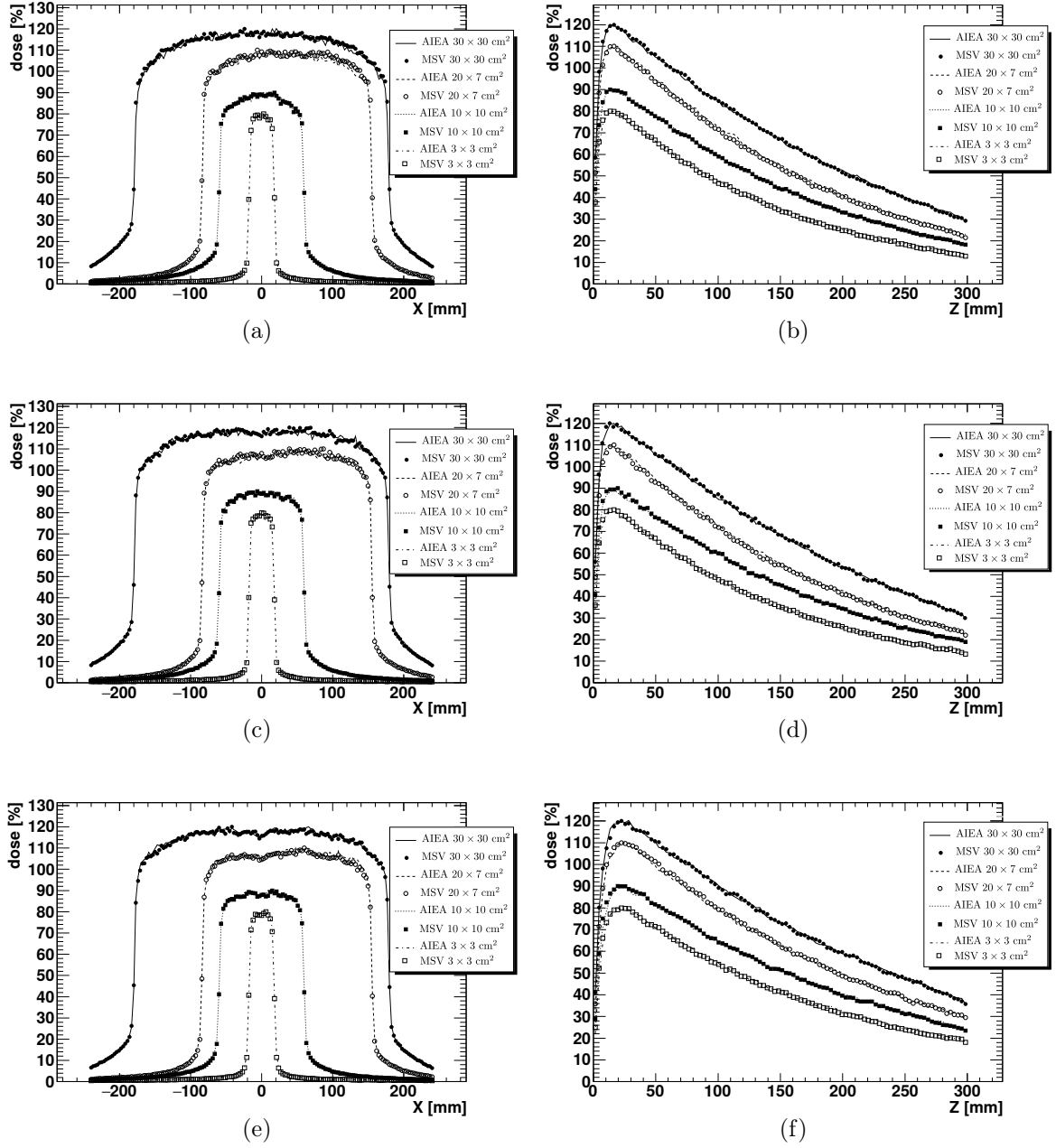
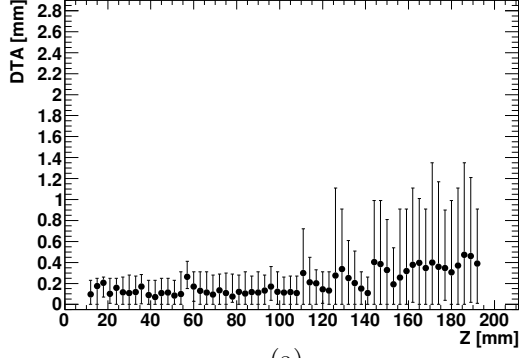
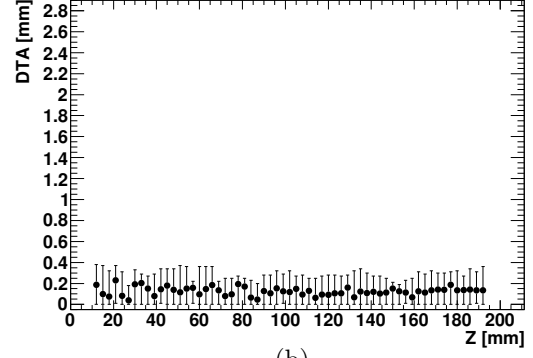


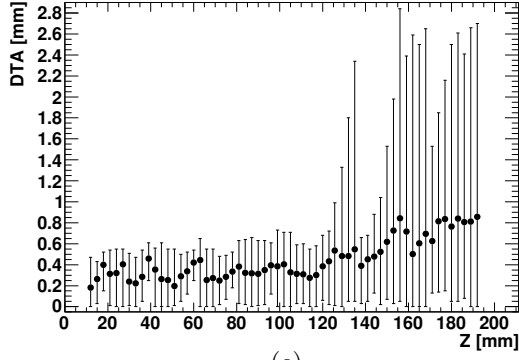
FIGURE 4.17: Comparaison entre les distributions de dose dans l'eau (à droite : rendement en profondeur sur l'axe ; à gauche : profils de dose à 20 cm) du MSV et des espaces des phases de l'AIEA pour les champs $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 7 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a, b) : *Varian TrueBeam* 6 MV ; (c, d) : *Elekta Precise* 6 MV. (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV.

$30 \times 30 \text{ cm}^2$ $20 \times 7 \text{ cm}^2$ 

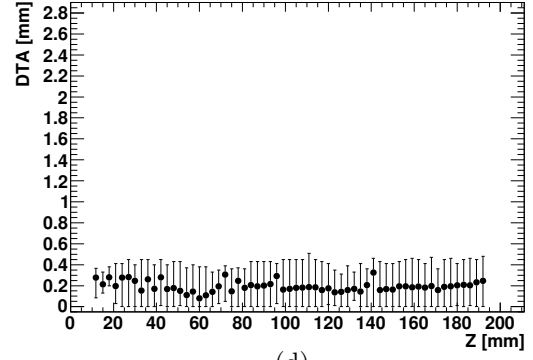
(a)



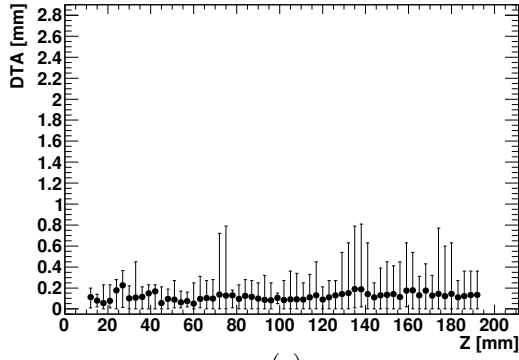
(b)



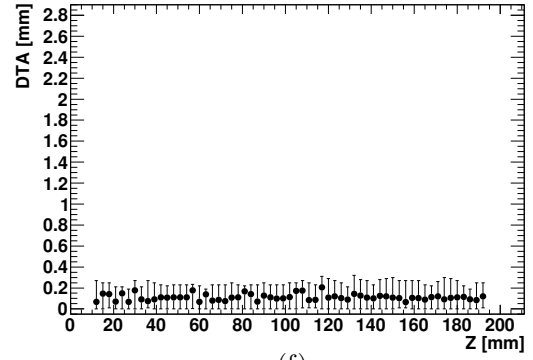
(c)



(d)

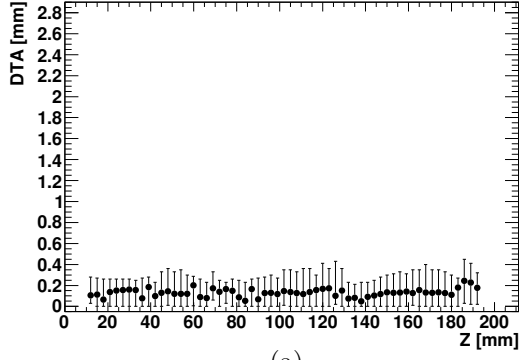


(e)

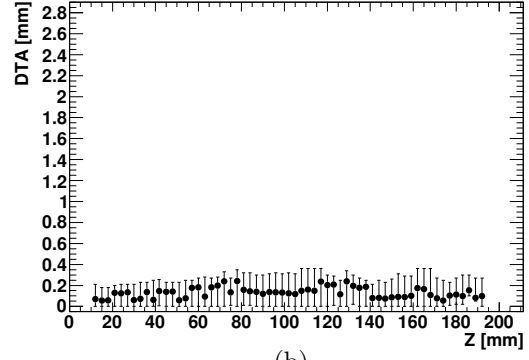


(f)

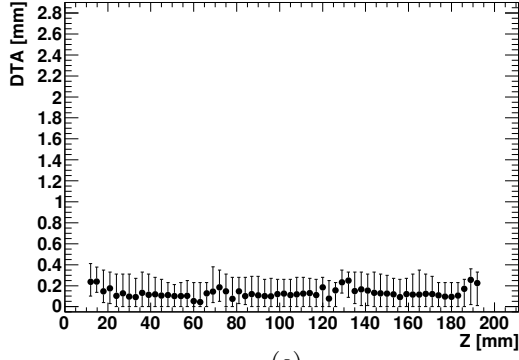
FIGURE 4.18: Variation de la DTA en fonction de la profondeur, pour les champs d'irradiation $20 \times 7 \text{ cm}^2$ (à droite) et $30 \times 30 \text{ cm}^2$ (à gauche). (a, b) : *Elekta Precise* 6 MV ; (c, d) : *Varian TrueBeam* 6 MV. (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV.

$10 \times 10 \text{ cm}^2$ $3 \times 3 \text{ cm}^2$ 

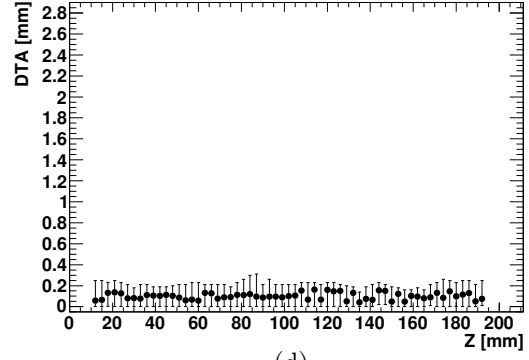
(a)



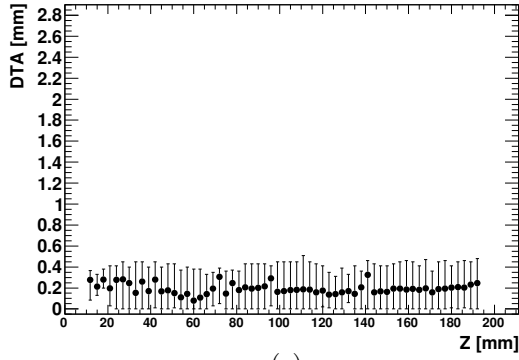
(b)



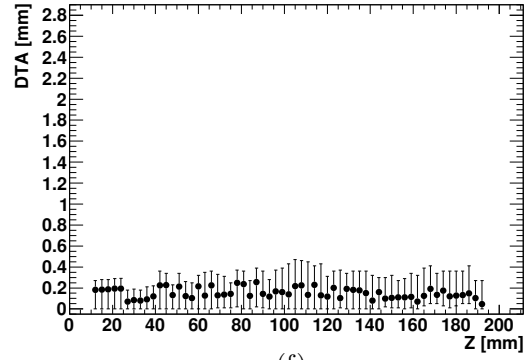
(c)



(d)



(e)



(f)

FIGURE 4.19: Variation de la DTA en fonction de la profondeur, pour les champs d'irradiation $3 \times 3 \text{ cm}^2$ (à droite) et $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (à gauche). (a, b) : *Elekta Precise* 6 MV ; (c, d) : *Varian TrueBeam* 6 MV. (e, f) : *Elekta Precise* 10 MV

TABLE 4.7: Analyse de la DTA dans la région du *build-up* pour différentes tailles de champ d'irradiation et énergies nominales de faisceau.

Faisceau	champ [cm ²]	DTA [mm]		
		Min	Max	Moyenne
<i>TrueBeam</i> 6 MV	30 × 30	0	0.8	0.3
	20 × 7	0	3.0	0.4
	10 × 10	0	0.9	0.3
	3 × 3	0	2.5	0.6
<i>Precise</i> 6 MV	30 × 30	0	2.5	0.4
	20 × 7	0	2.2	0.5
	10 × 10	0.1	3.0	0.8
	3 × 3	0	2.5	0.6
<i>Precise</i> 10 MV	30 × 30	0	2.8	0.8
	20 × 7	0	2.5	0.6
	10 × 10	0	2.9	1.0
	3 × 3	0.2	3.0	0.8

1.25 mm pour le 10 MV. La pénombre est définie par la région au bord du champ d'irradiation, limitée par les points recevant respectivement 20% et 80% de la dose sur l'axe central du faisceau. La largeur de la pénombre augmente en fonction de la profondeur et donc le pas d'interpolation change également en fonction de ce paramètre.

Les résultats obtenus ont montré que la DTA moyenne pour toutes les courbes de rendement en profondeur dans la région du *build-up* correspondante au faisceau 10 MV du linac *Elekta Precise*, ne dépasse pas le millimètre tab.4.7. Les courbes des figures 4.18, 4.19 montrent la variation de la DTA en fonction de la profondeur, pour les différentes tailles de champs et énergies de faisceaux. Les barres d'erreurs représentent l'intervalle de variation de la DTA, défini par les valeurs maximales et minimales obtenues à la profondeur de calcul z_i . La DTA moyenne est inférieure à 0.6 mm et 0.8 mm, respectivement pour les faisceaux *Varian TrueBeam* 6 MV et *Elekta Precise* 6 MV/10 MV. Ces valeurs sont en dessous des seuils conventionnels fixés habituellement à 3 mm ou encore à 2 mm utilisés en planification de traitement. Les fluctuations apparentes sur la figure 4.18 peuvent s'expliquer par l'effet de la diffusion latérale plus visible dans les champs d'irradiation large et moins accentué dans les petits champs d'irradiation.

Le MSV présenté a montré des résultats satisfaisants pour l'énergie nominale du faisceau 6 MV ; le même modèle a été validé pour deux linacs *Varian TrueBeam* et *Elekta Precise*. De bons résultats ont été également obtenus pour l'énergie 10 MV de l'accélérateur *Elekta Precise*, sans modification des paramètres de contrôle figs.4.16, 4.17. Généralement la précision du modèle est bonne dans les régions critiques où les variations du dépôt de dose sont importantes. Les distributions de dose calculées avec le MSV s'accordent très bien avec les distributions de dose de référence en termes d'analyse γ_{index} et DTA indépendamment de la configuration du champ d'irradiation et de l'énergie du faisceau.

4.3.2.2 Estimation de l'efficacité du calcul

Le nombre d'événements calculé par unité de temps augmente rapidement en fonction du nombre de `threads` exécutés en parallèle fig.4.20 (a).

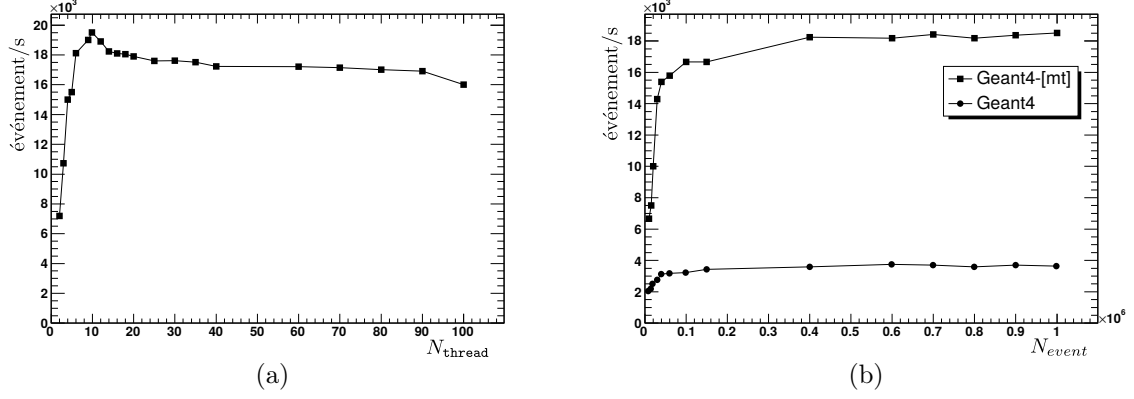


FIGURE 4.20: Vitesses d'exécution de `Geant4` et `Geant4-[mt]`. (a) : évolution de la vitesse d'exécution de `Geant4-[mt]` en fonction du nombre de `threads`; (b) : variation de la vitesse d'exécution de `Geant4` et `Geant4-[mt]` en fonction du nombre total d'événements simulés.

La vitesse maximale est atteinte pour 10 `threads`, pour la configuration matérielle que nous avons, l'augmentation du nombre de `threads` au-delà de 10, ne montre aucune amélioration.

Pour estimer l'efficacité de `Geant4-[mt]`, nous avons calculé le nombre moyen d'événements traités par unité de temps en fonction du nombre total d'événements simulés. La comparaison entre les vitesses de traitement de `Geant4` et `Geant-[mt]`, exécutant le même code de simulation, montre un rapport approximativement égal à 6, lorsque N_{event} tend vers l'infini. Nous remarquons également que la vitesse d'exécution est quasi-constante et indépendante du nombre d'événements primaires simulés, pour les deux modes séquentiel et `multi-threading`.

4.4 Conclusion

L'objectif principal de ce travail est de développer un nouveau modèle de sources virtuelles, permettant de simuler efficacement et avec suffisamment de précision un faisceau de photons produit par un accélérateur linéaire médical. L'approche proposée a été validée avec le code de simulation `Geant4` en mode `multi-threading`, pour optimiser le temps d'exécution et également la mémoire vive utilisée. Un deuxième objectif important consiste à présenter une méthode de reconstruction, se basant sur la décomposition du faisceau en deux composantes, la première représente la source de rayonnement primaire et la deuxième représente les sources de rayonnement diffusé.

Nous avons proposé une procédure permettant d'extraire les données décrivant les variables caractérisant un faisceau de photons représenté par son espace des phases.

Nous avons utilisé les espaces des phases disponibles dans la base de données à accès publique de l'AIEA, pour évaluer et tester le MSV. Les espaces des phases ont été convertis en distributions statistiques corrélées traduisant les dépendances entre la position, la direction et l'énergie des particules. Le fichier descriptif comportant les densités de probabilité dérivées, occupe un espace mémoire sur le disque 4500 fois plus petit que le fichier d'espace des phases original. Pour s'assurer de la compatibilité du MSV avec une variété de faisceau de photons, *Elekta precise* 6 MV/10 MV et *Varian TrueBeam* 6 MV ont été validés.

Les performances du MSV ont été évaluées en deux étapes, la première concerne la validation de la reconstruction de l'espace des phases, la deuxième est focalisée sur la précision du calcul de dose dans l'eau. Dans la première partie, la qualité de reconstruction a été estimée par une comparaison entre les histogrammes corrélés des espaces des phases de l'AIEA et les histogrammes reconstruits avec le MSV. Un accord de 99% a été obtenu pour la majorité des combinaisons de variables.

Dans la deuxième partie du processus de validation, une comparaison des distributions de dose dans l'eau a été faite pour trois champs d'irradiation de forme carrée, de dimensions respectives $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et un seul champ rectangulaire asymétrique de $20 \times 7 \text{ cm}^2$. L'analyse $\gamma_{2\%/3 \text{ mm}}$ et $\gamma_{3\%/3 \text{ mm}}$ des courbes de rendement en profondeur et profils de dose à d_{max} , 10 cm et 20 cm a donné un bon accord avec un taux de réussite supérieur à 99% dans la plupart des cas étudiés pour les énergies des faisceaux évalués. Dans les régions à fort gradient de dose la DTA moyenne est inférieure à 2 mm dans la région du *build-up*, ainsi que dans la pénombre à différentes profondeurs.

D'autres investigations peuvent être effectuées pour étudier les performances du modèle pour des faisceaux de photons d'énergie supérieure. Cependant et à ce niveau, nous avons montré que le concept du modèle proposé est adapté au couplage avec un code MC rapide pour la planification de traitement.

L'analyse de l'efficacité du calcul a montré que l'utilisation de l'extension **Geant4-[mt]** pour l'exécution parallèle, améliore de manière significative le temps de simulation tout en conservant la précision du code séquentiel **Geant4**. Pour notre configuration matérielle, la vitesse maximale de traitement a été obtenue pour un nombre optimal de **threads** égal à 10. Nous pouvons noter également que l'analyse de l'efficacité en termes du temps de traitement a montré que **Geant4-[mt]** est approximativement 6 fois plus rapide que **Geant4**.

Chapitre 5

Optimisation de la simulation Monte Carlo des faisceaux 6/10 MV : Élaboration et développement sous Geant4-[mt] d'un modèle théorique du collimateur multilames

5.1 Introduction

Dans le chapitre précédant nous avons présenté un MSV permettant la reconstruction des faisceaux de photons de qualité 6/10 MV en dessous du collimateur primaire. Le processus de collimation du faisceau généré par le MSV est très gourmand en termes de temps d'exécution. Le transport d'une particule est simulé dans les composantes du collimateur multilames tant que son énergie est supérieure au seuil de production de particules secondaires. Logiquement le temps de simulation dépend de la surface obstruée par le collimateur secondaire, plus le champ d'irradiation est petit plus le temps de calcul requis, pour simuler l'interaction des particules qui seront par la suite très probablement absorbées dans le collimateur, est significatif.

Dans le présent chapitre nous proposons d'améliorer l'efficacité du modèle précédent [Aboulbanine & El Khayati \(2018\)](#), à travers l'émulation de l'effet du collimateur sur la fluence d'un faisceau de photons. La collimation est effectuée par une fonction analytique que nous appelons "Fonction Filtre du Collimateur" (FFC). L'idée de base consiste à filtrer la fluence de l'espace des phases avec cette fonction, ensuite faire une reconstruction du faisceau sur la base de cette fluence filtrée. Le faisceau est décomposé en trois sources élémentaires, une source de photons primaires, une première source de photons diffusés produits par interaction des photons de freinage avec les composantes au-dessus de l'espace des phases et une deuxième source de rayonnement diffusé ou bien source de contamination (photons, électrons et positrons diffusés par les mâchoires et le collimateur multilames).

La première partie de la validation du nouveau modèle a été réservée pour l'évalua-

tion de la conservation des corrélations entre les variables de l'espace des phases, dans la deuxième partie une comparaison qualitative des distributions de dose a été effectuée. Le code de calcul **Geant4-[mt]** a été utilisé pour calculer la dose dans un fantôme d'eau voxelisé.

5.2 Matériels et méthodes

5.2.1 Modèle du faisceau de photons

Dans le modèle précédent la reconstruction de la position, la direction et l'énergie des particules se basait sur l'échantillonnage des variables aléatoires à partir des fonctions de densité associées. Dans le présent modèle trois améliorations majeures seront implémentées [Aboulbanine & El Khayati \(2019\)](#). (i) nous allons réduire la quantité de données nécessaire pour faire la reconstruction, uniquement les distributions corrélées 1D de l'énergie et les distributions spatiales 2D des particules seront utilisées ; (ii) la collimation du faisceau sera émulée par la fonction paramétrique que nous avons élaboré (FFC) adaptée pour un calcul rapide et suffisamment précis ; (iii) le modèle aura une composante source supplémentaire décrivant les particules diffusées par le collimateur multilames.

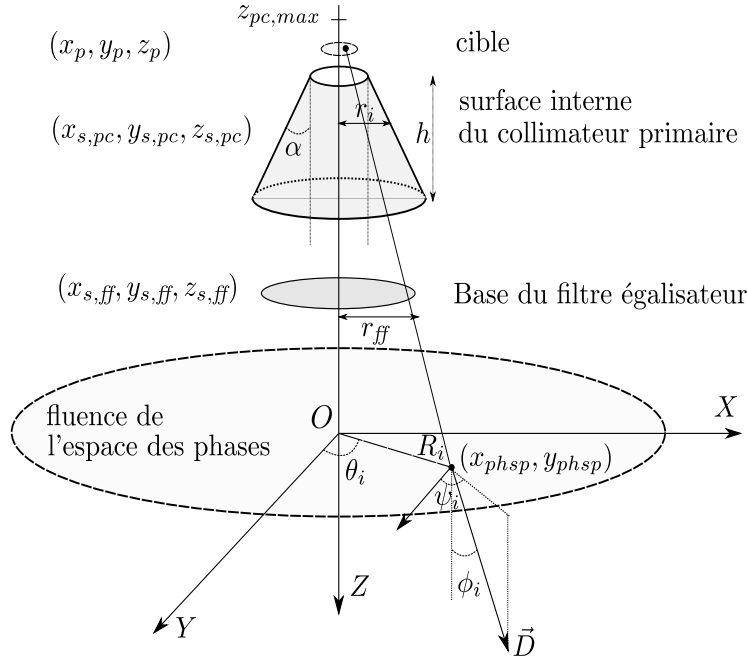


FIGURE 5.1: Reconstruction de la direction d'une particule eq.4.1 en fonction des coordonnées de la position initiale $(x_{p/s}, y_{p/s}, z_{p/s})$ et du point d'impact de la particule avec l'espace des phases $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$.

La fluence de photons d'un faisceau généré par un linac représente la contribution de sources virtuelles multiples [Fix et al. \(2001\)](#), [Grevillot, Frisson, Maneval, Zahra, Badel & Sarrut \(2011\)](#). Dans ce qui suit nous allons considérer que la source primaire représente les photons du Bremsstrahlung provenant directement de la cible

de l'accélérateur ; le deuxième groupe de particules est principalement composé de rayonnements diffusés par le collimateur primaire et le filtre égalisateur ; le dernier groupe décrit les particules diffusées par le collimateur multilames et dont la contribution dépend de la taille du champ d'irradiation et de l'énergie nominale du faisceau de photons. Un algorithme de reconstruction est élaboré pour restituer chacune des composantes du faisceau.

Nous pouvons écrire la fluence totale reconstruite par le modèle du faisceau de photons à l'isocentre sous la forme :

$$\Phi = \overbrace{\Phi_{cible} + \Phi_{FF} + \Phi_{pc}}^{\Phi_{phsp}} + \Phi_{S_2} \quad (5.1)$$

Φ_{S_1}

Φ_{cible} : photons issus directement de la cible (source primaire).

Φ_{S_1} : première source de particules diffusées, cette composante représente principalement la contribution des particules diffusées par le filtre égalisateur et le collimateur primaire notée respectivement Φ_{FF} et Φ_{pc} .

Φ_{phsp} : fluence des particules dans les espaces des phases au-dessus du collimateur multilames.

Φ_{S_2} : fluence des particules diffusées par les mâchoires et le collimateur multilames.

Les électrons et positrons diffusés par le collimateur primaire, filtre égalisateur et autres composantes au-dessus de l'espace des phases ne sont pas considérés ; leurs pourcentage calculé à partir des fichiers de l'AIEA est approximativement égal à 1% de la fluence totale de l'espace des phases du linac *Elekta Precise* 6 MV à titre d'exemple.

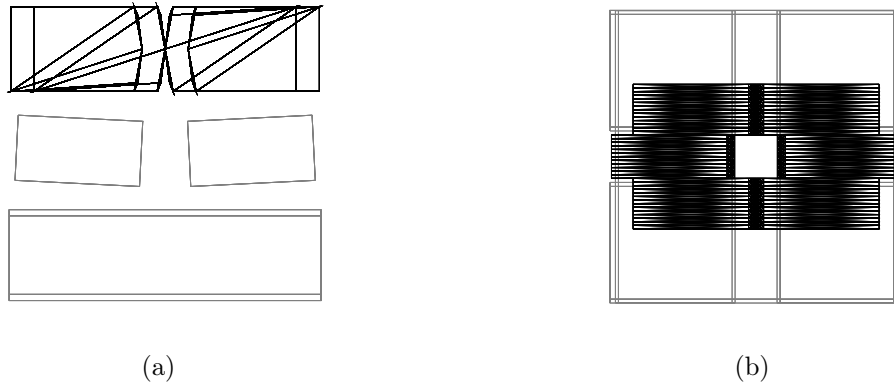


FIGURE 5.2: Visualisation OpenGL du collimateur multilames utilisé dans les simulations. (a) : vue latérale ; (b) : *beam eye view*.

Les spectres en énergie et les distributions spatiales ont été dérivés des espaces des phases de l'AIEA suivant la même procédure d'extraction détaillée dans le chapitre précédant. Les distributions statistiques de l'énergie pour la source des particules diffusées ont été déterminées différemment. Nous avons simulé l'interaction du faisceau de photons généré à partir d'un espace des phases avec le collimateur multilames

de la figure 5.2. L’effet de la variation de la taille du champ d’irradiation sur les spectres en énergie des particules et leurs distributions spatiales a été étudié.

5.2.1.1 Source de rayonnement primaire

Des mesures de la distribution spatiale des photons primaires provenant de la cible du linac ont été publiées dans plusieurs travaux dans l’objectif de déterminer la pénombre du faisceau primaire et le bruit associé aux applications d’imagerie par Rayons X Jaffray et al. (1993), Sham et al. (2008). Dans la simulation MC des accélérateurs linéaires médicaux, la distribution spatiale des électrons primaires, leur spectre en énergie sont des paramètres d’ajustement permettant de contrôler la précision de la distribution de dose résultante Sheikh-Bagheri et al. (2000).

Dans le modèle que nous allons développer nous considérons que la distribution spatiale des photons à la sortie de la cible est décrite par une loi *gaussienne*. La fluence Φ_{cible} représente la projection des photons issus de la cible, sur l’espace des phases Aboulbanine & El Khayati (2018). La direction d’une particule sera calculée en fonction de la position de deux points, un “point de départ” (x_p, y_p, z_p) échantillonné d’une distribution *gaussienne* et un “point d’arrivée” $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$ échantillonné de la distribution spatiale de l’espace des phases fig.5.1. Les interdépendances discutées dans le chapitre précédant seront utilisées pour déterminer l’énergie d’une particule.

5.2.1.2 Source (1) de rayonnement diffusé

Les composantes de la partie invariable de la tête d’irradiation d’un linac, telles que le collimateur primaire et le cône égalisateur sont toutes caractérisées par des formes géométriques simples. Afin de faire une reconstruction de cette composante du faisceau, nous avons besoin de connaître la position, la direction et l’énergie d’une particule. Nous allons adopter la même idée de base pour déterminer la position et la direction des particules de la source primaire. La position $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$ est échantillonnée de la distribution spatiale de l’espace des phases. La direction est également déterminée en fonction de deux points, le point de départ (x_s, y_s, z_s) et le point d’arrivée $(x_{phsp}, y_{phsp}, z_{phsp})$. Le point de départ est noté $(x_{s,pc}, y_{s,pc}, z_{s,pc})$, $(x_{s,ff}, y_{s,ff}, z_{s,ff})$ pour indiquer respectivement la position d’une particule provenant du collimateur primaire ou du filtre égalisateur.

Nous allons considérer que les composantes du vecteur position initial des particules diffusées sont uniformément distribuées sur la surface interne du collimateur primaire et la base du filtre égalisateur¹. L’échantillonnage de la distribution uniforme

1. Une simulation MC d’une simple géométrie test de la tête d’irradiation d’un linac, a été effectuée pour déterminer la nature de la répartition spatiale des particules diffusées du collimateur primaire et du filtre égalisateur. La géométrie est composée d’une cible, d’un collimateur primaire conique en Tungstène et d’un filtre égalisateur constitué d’alliage Nickel, Cuivre et Tungstène. Une distribution uniforme a été obtenue pour le collimateur primaire, cependant la loi statistique est quasi-uniforme dans le cas du cône égalisateur, cette dernière peut légèrement changer en fonction de la géométrie et la composition du filtre égalisateur.

de particule épousant la forme de la surface interne du collimateur et la base du cône égalisateur se fera par la méthode de transformation inverse de la fonction de répartition. Pour faire la reconstruction du nuage de points uniforme, nous allons définir dans un premier temps la densité de probabilité p uniformément distribuée sur la surface latérale d'un cône de hauteur H . Nous supposons que le sommet du cône est placé à l'origine du repère (centre de l'espace des phases fig.5.1).

Une translation sur l'axe (OZ) permettra de déplacer les points reconstruits vers la bonne position du cône au-dessus de l'espace des phases. La distribution des particules en fonction du rayon r_i à la position z_i est égale à :

$$p(r_i) = 2\pi r_i \quad r_i \in [0, r_{max}] \quad (5.2)$$

r_{max} est le rayon de la base du cône.

La fonction de répartition $P(r_i)$ de la densité de probabilité $p(r_i)$ est définie par l'intégrale :

$$\begin{aligned} P(r_i) &= \int_0^{r_i} p(x) dx \quad r_i \in [0, r_{max}] \\ &= \pi r_i^2 \end{aligned} \quad (5.3)$$

À partir de la dépendance entre le rayon r_i et la position z_i , nous pouvons écrire l'expression précédente sous la forme :

$$P(z_i) = \pi(z_i \tan(\alpha))^2 \quad z_i \in [0, H] \quad (5.4)$$

L'inversion de la fonction $P(z_i)$ de l'équation 5.4 permet d'exprimer la position z_i en fonction d'une variable aléatoire uniforme $\zeta \in [\zeta_{min}, \zeta_{max}]$.

$$z_i = P^{-1}(\zeta) = \sqrt{\frac{\zeta}{\pi}} \cdot \frac{1}{\tan(\alpha)} \quad (5.5)$$

La surface interne du collimateur est une portion de la surface latérale du cône virtuel de hauteur H . Les valeurs maximale et minimale de ζ sont calculées pour échantillonner la surface d'intérêt.

$$\begin{aligned} \zeta_{max} &= \pi(H \tan(\alpha))^2, \\ \zeta_{min} &= \pi[(H - h) \tan(\alpha)]^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

h est la hauteur du collimateur primaire fig.5.1.

La variable ζ est uniformément distribuée sur l'intervalle $[\zeta_{min}, \zeta_{max}]$, la variable résultante z_i varie dans l'intervalle $[H - h, H]$.

Le calcul des composantes du vecteur position nécessite l'instanciation d'une deuxième variable aléatoire β uniformément distribuée sur l'intervalle $[0, 2\pi]$. L'expression du vecteur position pour les particules issues du collimateur primaire ($x_{s,pc}$, $y_{s,pc}$, $z_{s,pc}$) s'écrit en fonction des variables z_i , β et α fig.5.1 :

$$\begin{aligned} x_{s,pc} &= z_i \tan(\alpha) \cos(\beta), \\ y_{s,pc} &= z_i \tan(\alpha) \sin(\beta), \\ z_{s,pc} &= z_{pc,max} + z_i \end{aligned} \quad (5.7)$$

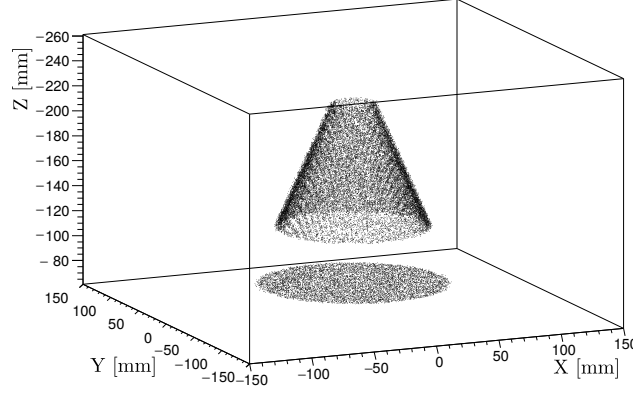


FIGURE 5.3: Reconstruction 3D de 4×10^4 points représentant la distribution spatiale des particules sur la surface interne du collimateur primaire et la base du filtre égalisateur.

La constante $z_{pc,max} = -261$ mm correspond à la position du sommet du collimateur virtuel fig.5.1. Un calcul similaire de la position des particules en dessous de la base du filtre égalisateur donne les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} x_{s,ff} &= r_{ff} \sqrt{\frac{\zeta}{\pi}} \cos(\beta), \\ y_{s,ff} &= r_{ff} \sqrt{\frac{\zeta}{\pi}} \sin(\beta), \\ z_{s,ff} &= z_{pc,max} + 1.3 \times h \end{aligned} \tag{5.8}$$

Les variables aléatoires $\zeta \in [0, 1]$ et $\beta \in [0, 2\pi]$ sont uniformément distribuées sur leurs intervalles respectifs.

La figure 5.3 montre une reconstruction de 4×10^4 points calculés à partir des équations 5.7 et 5.8. L'énergie de chaque particule diffusée est échantillonnée du spectre en énergie corrélé avec l'angle de diffusion ϕ .

5.2.1.3 Source (2) de rayonnement diffusé

La contribution des rayonnements diffusés par le collimateur secondaire (mâchoires X/Y et collimateurs multilames) dépend de la taille du champ d'irradiation, de la composition du collimateur et du spectre énergétique du faisceau incident. La quantification de la variation du rayonnement diffusé en fonction de la taille du champ permettra d'établir un modèle décrivant cette composante du faisceau.

L'interaction des faisceaux de photons générés à partir des espaces des phases de l'AIEA avec les composantes du collimateur multilames fig.5.4 est simulée pour sept champs d'irradiation sous forme carrée de différentes dimensions. Ce collimateur est composé de deux paires de mâchoires X/Y et de 40 paires de lames situées entre l'espace des phases et le plan de détection fig.5.4. Toute particule diffusée par le collimateur et passant à travers le plan de détection (fig.5.4) est analysée pour déterminer la distribution spatiale, le spectre énergétique ainsi que la proportion de photons, d'électrons et de positrons. La même procédure est appliquée à trois espaces

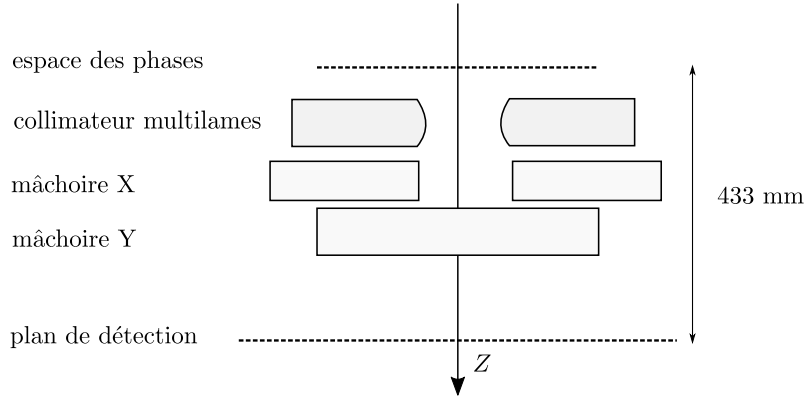


FIGURE 5.4: Géométrie et positionnement du collimateur multilames entre le plan de l'espace des phases et le plan de détection des particules.

des phases correspondant à trois faisceaux de photons : *Elekta Precise* 6/10 MV et *Varian TrueBeam* 6 MV.

Plusieurs fonctions d'ajustement ont été établies pour approximer les spectres en énergie et les distributions spatiales des particules diffusées. Les figures 5.5 à 5.8 montrent des exemples de ces distributions statistiques pour les trois faisceaux de photons étudiés. Le pourcentage de rayonnement diffusé augmente exponentiellement en fonction de la taille du champ d'irradiation fig.5.5 (a,c,e). Un polynôme de deuxième degré a été utilisé pour ajuster le pourcentage de chaque type de particule 5.5 (b,d,f). Les paramètres x_i et leurs erreurs correspondantes Δx_i pour chaque fonction d'ajustement ont été calculés par le package d'analyse de données ROOT Brun & Rademakers (1997) tab.5.1.

$$P_S^T(x) = \exp(a_1 x + a_0), \quad P_S(x) = \sum_{i=0}^2 a_i x^i \quad (5.9)$$

Les courbes de la figure 5.5 représentent le nombre de particules diffusées normalisé par le nombre total de particules simulées. L'incertitude statistique pour ce calcul est inférieure à 0.3%.

$$G_i(x|\mu_i, \sigma_i) = A_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{(x - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) \quad (5.10)$$

$$P_{e^+, e^-}(E) = \frac{1}{E} G_1(\log_2(E)|\mu_1, \sigma_1) \cdot G_2(E|\mu_2, \sigma_2) \quad (5.11)$$

$$P_{h\nu}(E) = \frac{1}{E} [P_{e^+, e^-}(E) \cdot E + G_3(E|\mu_3, \sigma_3)] \quad (5.12)$$

Les spectres en énergie n'ont pas été influencés par le changement de taille du champ d'irradiation, seul le nombre de particules diffusées augmente en fonction de ce paramètre fig.5.9. Nous allons utiliser dans ce qui suit les spectres du champ d'irradiation $20 \times 20 \text{ cm}^2$ pour échantillonner l'énergie des particules diffusées.

La fonction d'ajustement des spectres en énergie pour les électrons et positrons eqs.5.10 et 5.11, figs.5.6 (c à f) et 5.7 (b,c) est basée sur le produit d'une fonction *log-normal* Cho et al. (2011) et une fonction *Gaussienne*. La même expression corrigée par une troisième fonction *gaussienne* permet de mieux ajuster la distribution en

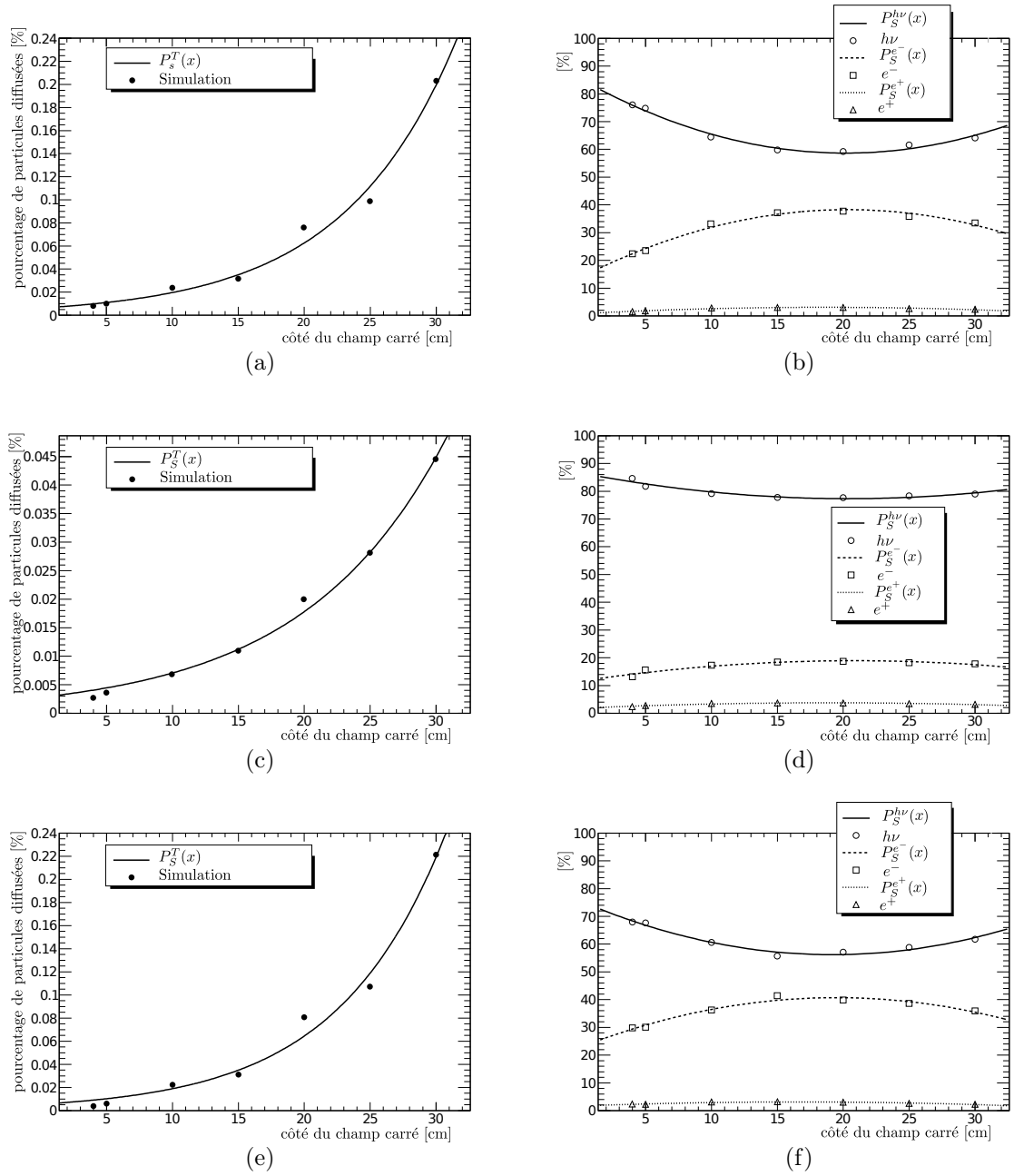


FIGURE 5.5: Représentation graphique du pourcentage simulé des rayonnements diffusés et des fonctions d'ajustement correspondantes en fonction de la taille du champ d'irradiation pour *Elekta Precise* 6/10 MV et *Varian TrueBeam* 6 MV respectivement. (a,c,e) : rayonnement total; (b,d,f) contributions des photons ($P_s^{h\nu}$), électrons ($P_s^{e^-}$) et positrons ($P_s^{e^+}$).

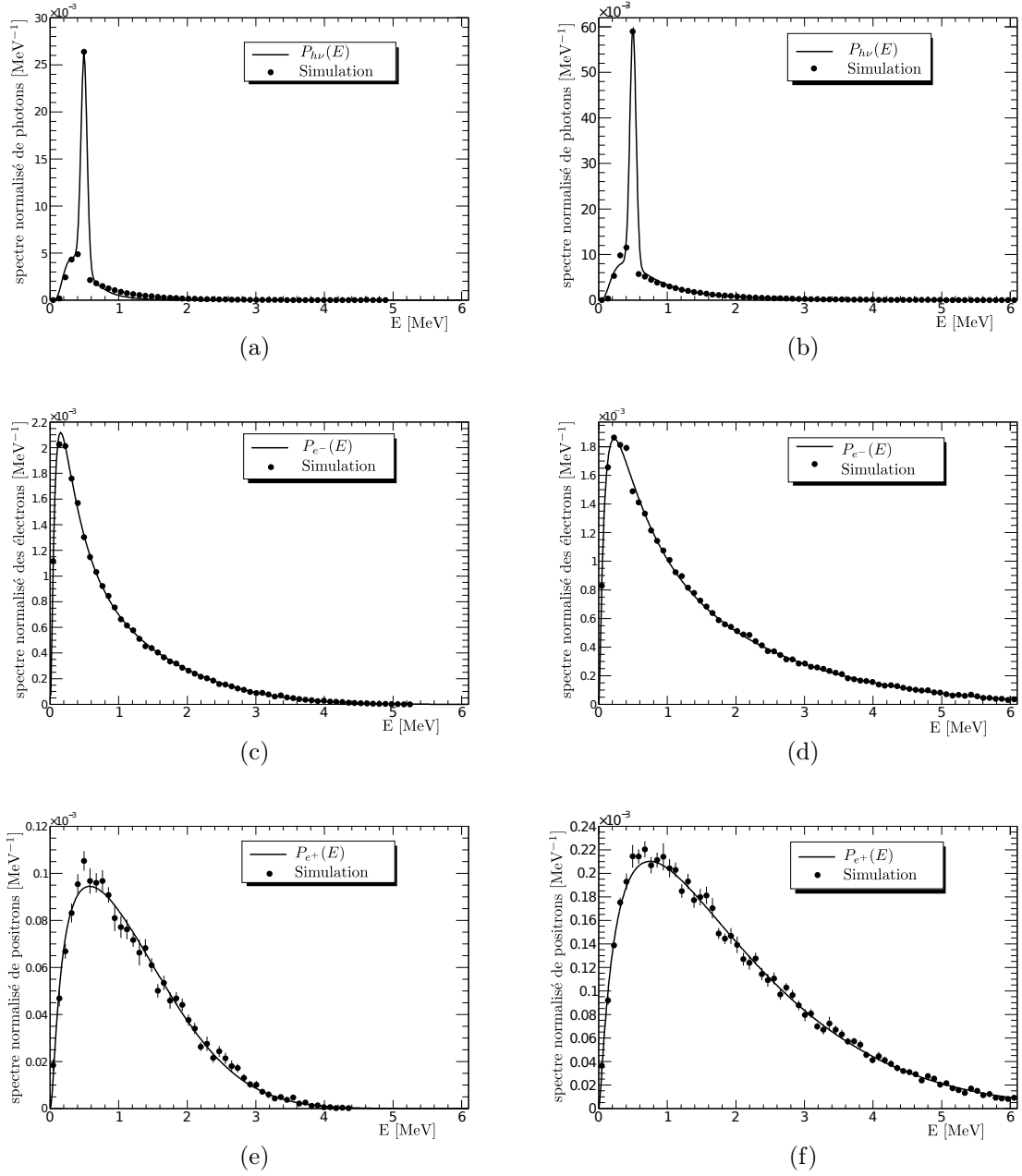


FIGURE 5.6: Représentation graphique de la fonction d'ajustement des spectres en énergie simulés des particules diffusées à travers un champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$ pour les faisceaux *Elekta Precise* 10 MV (à droite) et *Elekta Precise* 6 MV (à gauche). Les densités de probabilité sont normalisées par l'énergie totale des particules diffusées. (a,b) : spectre de photons dont le pic visible correspond aux photons d'annihilation ; (c,d) : spectre électrons et (e,f) : spectre positrons.

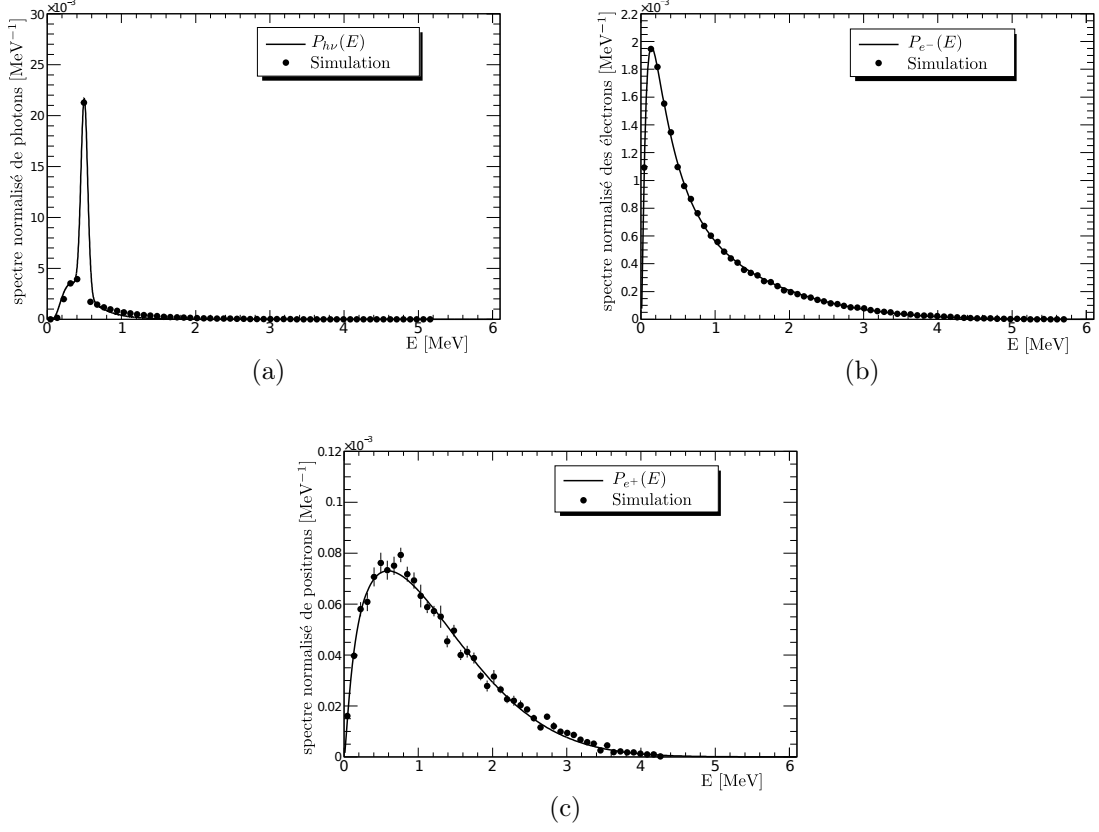


FIGURE 5.7: Représentation graphique de la fonction d'ajustement des spectres en énergie simulés des particules diffusées à travers un champ $20 \times 20 \text{ cm}^2$ pour le faisceau *Varian TrueBeam* 6 MV. Les densités de probabilité sont normalisées par l'énergie totale des particules diffusées. (a) : photons ; (b) : électrons et (c) : positrons.

TABLE 5.1: Paramètres d'ajustement des fonctions $P_S^T(x)$, $P_S^{h\nu}(x)$, $P_S^{e^-}(x)$ et $P_S^{e^+}(x)$ eq.5.9 pour les trois faisceaux de photons évalués fig.5.5.

	$a_i + \Delta a_i$	<i>TrueBeam</i> 6 MV	<i>Precise</i> 6 MV	<i>Precise</i> 10 MV
$P_S^T(x)$	$(a_0 \pm \Delta a_0)$	-5.2 ± 0.4	-5.1 ± 0.4	-5.9 ± 0.1
	$(a_1 \pm \Delta a_1) \text{ cm}^{-1}$	0.12 ± 0.01	0.11 ± 0.01	0.10 ± 0.01
$P_S^{h\nu}(x)$	$(a_0 \pm \Delta a_0)$	-5.2 ± 0.4	-5.1 ± 0.4	-5.9 ± 0.1
	$(a_1 \pm \Delta a_1) \text{ cm}^{-1}$	-2.02 ± 0.21	-2.7 ± 0.2	-0.9 ± 0.2
	$(a_2 \pm \Delta a_2) \text{ cm}^{-2}$	0.05 ± 0.01	0.07 ± 0.01	0.021 ± 0.003
$P_S^{e^-}(x)$	$(a_0 \pm \Delta a_0)$	22.7 ± 1.3	13.7 ± 1.3	11.5 ± 0.9
	$(a_1 \pm \Delta a_1) \text{ cm}^{-1}$	1.8 ± 0.2	2.4 ± 0.2	0.7 ± 0.1
	$(a_2 \pm \Delta a_2) \text{ cm}^{-2}$	-0.04 ± 0.01	-0.06 ± 0.01	-0.017 ± 0.003
$P_S^{e^+}(x)$	$(a_0 \pm \Delta a_0)$	1.6 ± 0.2	0.8 ± 0.2	1.8 ± 0.2
	$(a_1 \pm \Delta a_1) \text{ cm}^{-1}$	0.20 ± 0.03	0.24 ± 0.03	1.8 ± 0.2
	$(a_2 \pm \Delta a_2) \text{ cm}^{-2}$	-0.005 ± 0.001	-0.006 ± 0.001	-0.006 ± 0.001

énergie des photons eq.5.12, fig.5.6 (a,b) et 5.7 (a). Les paramètres d'ajustement des spectres correspondants au champ d'irradiation $20 \times 20 \text{ cm}^2$ sont données dans la table 5.2.

TABLE 5.2: Paramètres d'ajustement des distributions $P_{h\nu}(E)$, $P_{e^-}(E)$ et $P_{e^+}(E)$ pour les faisceaux de photons *Elekta Precise* 6/10 MV fig.5.6.

	$P_{h\nu}(E)$	$P_{e^-}(E)$	$P_{e^+}(E)$
<i>Elekta Precise</i> 6 MV			
$A_1 \pm \Delta A_1$	$(9.2 \pm 0.8) \text{ MeV}^{-1}$	0.79 ± 0.01	0.027 ± 0.004
$(\mu_1 \pm \Delta\mu_1) \text{ MeV}$	-0.932 ± 0.003	-1.17 ± 0.01	0.29 ± 0.19
$(\sigma_1 \pm \Delta\sigma_1) \text{ MeV}$	0.497 ± 0.001	0.975 ± 0.004	1.153 ± 0.005
$A_2 \pm \Delta A_2$	$(5.2 \pm 0.5) \text{ MeV}^{-1}$	0.18 ± 0.01	0.027 ± 0.004
$(\mu_2 \pm \Delta\mu_2) \text{ MeV}$	16.7 ± 0.1	2.81 ± 0.02	1.38 ± 0.14
$(\sigma_2 \pm \Delta\sigma_2) \text{ MeV}$	4.16 ± 0.02	1.24 ± 0.01	1.13 ± 0.03
$A_3 \pm \Delta A_3$	0.0021 ± 0.0001	–	–
$(\mu_3 \pm \Delta\mu_3) \text{ MeV}$	0.495 ± 0.004	–	–
$(\sigma_3 \pm \Delta\sigma_3) \text{ MeV}$	0.045 ± 0.002	–	–
$R^2 (\%)$	97.1	99.6	96.1
<i>Elekta Precise</i> 10 MV			
$A_1 \pm \Delta A_1$	$(7.7 \pm 0.2) \text{ MeV}^{-1}$	0.169 ± 0.004	0.21 ± 0.01
$(\mu_1 \pm \Delta\mu_1) \text{ MeV}$	-0.7 ± 0.1	-1.81 ± 0.02	2.77 ± 0.06
$(\sigma_1 \pm \Delta\sigma_1) \text{ MeV}$	0.65 ± 0.03	1.21 ± 0.01	1.61 ± 0.01
$A_2 \pm \Delta A_2$	$(20.2 \pm 0.5) \text{ MeV}^{-1}$	1.694 ± 0.005	0.205 ± 0.01
$(\mu_2 \pm \Delta\mu_2) \text{ MeV}$	17.0 ± 0.2	3.19 ± 0.06	1.7 ± 0.2
$(\sigma_2 \pm \Delta\sigma_2) \text{ MeV}$	4.1 ± 0.6	2.55 ± 0.04	3.18 ± 0.05
$A_3 \pm \Delta A_3$	0.0058 ± 0.0001	–	–
$(\mu_3 \pm \Delta\mu_3) \text{ MeV}$	0.51 ± 0.01	–	–
$(\sigma_3 \pm \Delta\sigma_3) \text{ MeV}$	0.045 ± 0.007	–	–
$R^2 (\%)$	97.2	99.6	96.1
<i>TrueBeam</i> 6 MV			
$A_1 \pm \Delta A_1$	$(7.1 \pm 0.1) \text{ MeV}^{-1}$	0.165 ± 0.005	0.043 ± 0.005
$(\mu_1 \pm \Delta\mu_1) \text{ MeV}$	-0.932 ± 0.002	-1.201 ± 0.008	1.84 ± 0.12
$(\sigma_1 \pm \Delta\sigma_1) \text{ MeV}$	0.497 ± 0.001	0.98 ± 0.04	1.51 ± 0.03
$A_2 \pm \Delta A_2$	$(5.05 \pm 0.06) \text{ MeV}^{-1}$	0.165 ± 0.005	0.043 ± 0.005
$(\mu_2 \pm \Delta\mu_2) \text{ MeV}$	16.782 ± 0.114	2.89 ± 0.02	0.5 ± 0.1
$(\sigma_2 \pm \Delta\sigma_2) \text{ MeV}$	4.189 ± 0.003	1.31 ± 0.01	1.35 ± 0.03
A_3	0.0021 ± 0.0001	–	–
$(\mu_3 \pm \Delta\mu_3) \text{ MeV}$	0.502 ± 0.007	–	–
$(\sigma_3 \pm \Delta\sigma_3) \text{ MeV}$	0.045 ± 0.002	–	–
$R^2 (\%)$	97.2	99.6	96.5

La distribution spatiale représente les contributions confondues des photons, électrons et positrons. Elle est ajustée par l'équation 5.13 composée de deux fonctions Gaussienne plus une constante g_0 fig.5.8 et table 5.3. Les incertitudes statistiques correspondantes sont inférieures à 1%.

La gaussienne multiple de l'équation 5.13 sera utilisée dans ce modèle pour l'échantillonnage des particules diffusées. Un paramétrage en fonction de la position des lames permettra de prendre en compte la configuration du champ d'irradiation. Pour

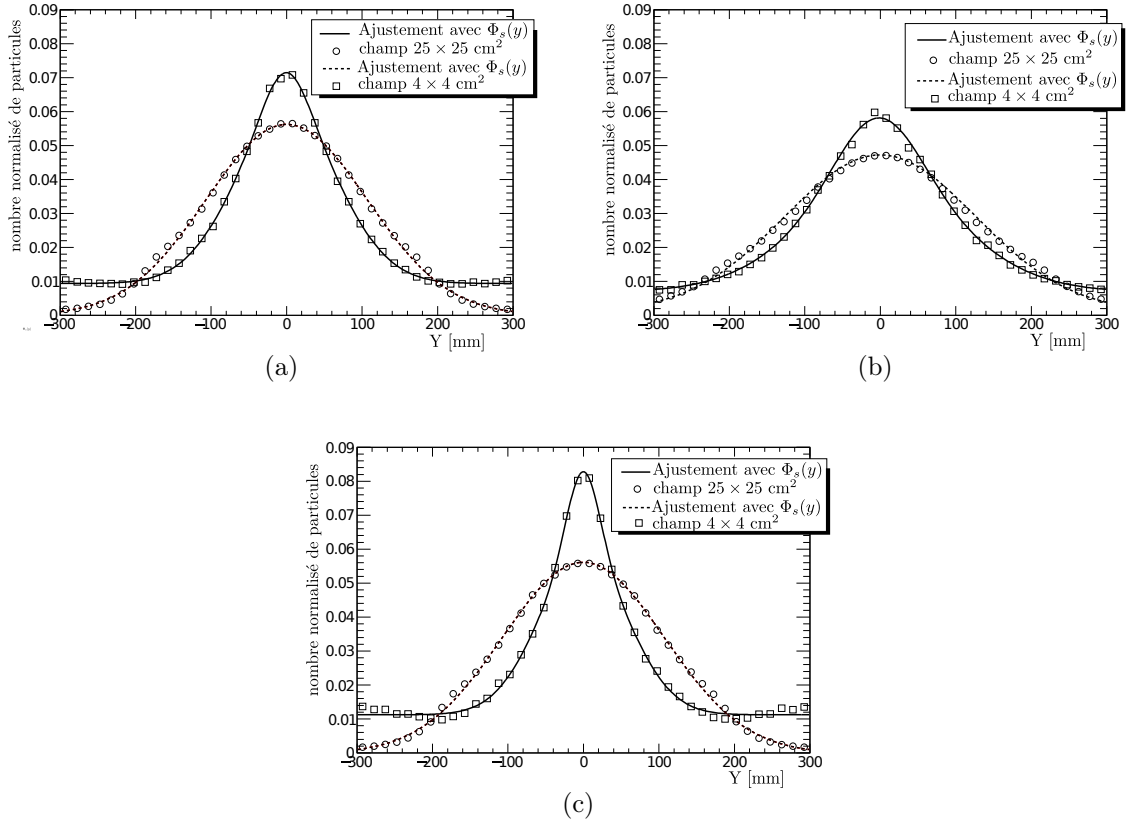


FIGURE 5.8: Distributions spatiales de l'ensemble des particules diffusées pour les champs d'irradiation $4 \times 4 \text{ cm}^2$ et $25 \times 25 \text{ cm}^2$, obtenues par simulation du transport de photons des faisceaux (a) : *Elekta Precise* 6 MV ; (b) : *Elekta Precise* 10 MV et (c) : *TrueBeam* 6 MV, à travers le collimateur multilame fig.5.2.

simplifier l'approche, nous allons estimer une valeur moyenne de $\sigma_{1,2}$ et $\mu_{1,2}$ eqs.5.14 et 5.15 paramètres liés respectivement à la taille et le centre du champ d'irradiation. Il faut noter que le collimateur modélisé dans ce travail est composé de 40 paires de lames. Pour un champ de modulation d'intensité décomposé en N segments, une distribution spatiale de rayonnement diffusé est attribuée à chaque champ élémentaire, la distribution totale dans ce cas sera la somme des contributions de tous les segments.

$$\Phi_S(y) = \sum_{i=1}^2 G_i(y|\mu_i, \sigma_i) + g_0 \quad (5.13)$$

$$\sigma_i = \frac{\sum_{a=1}^{n_l} (y_i^a - y_i^b)}{2n_l} \quad (5.14)$$

$$\mu_i = \frac{\sum_{a=1}^{n_l} (y_i^a + y_i^b)}{2n_l} \quad (5.15)$$

y_i^a, y_i^b : positions respectives des lames a et b de la i^{ieme} paire.
 n_l : nombre de lames dans le collimateur multilames fig.5.2.

La majorité des champs d'irradiation a une configuration irrégulière formée par le collimateur multilames pour mieux conformer le volume cible. Les simulations effec-

TABLE 5.3: Paramètres d'ajustement des distributions spatiales (eq.5.13) des particules diffusées pour les champs d'irradiation $4 \times 4 \text{ cm}^2$ et $25 \times 25 \text{ cm}^2$, pour les trois faisceaux de photons évalués.

	$4 \times 4 \text{ cm}^2$	$25 \times 25 \text{ cm}^2$
<i>Varian TrueBeam 6 MV</i>		
$(A_1 \pm \Delta A_1)$	1.2 ± 0.1	1.82 ± 0.05
$(\mu_1 \pm \Delta \mu_1) \text{ mm}$	0.00 ± 0.01	0.00 ± 0.01
$(\sigma_1 \pm \Delta \sigma_1) \text{ mm}$	21 ± 1	75 ± 2
$A_2 \pm \Delta A_2$	7.3 ± 0.1	13.1 ± 0.2
$(\mu_2 \pm \Delta \mu_2) \text{ mm}$	0 ± 0.03	0.0 ± 0.0
$(\sigma_2 \pm \Delta \sigma_2) \text{ mm}$	60 ± 1	112 ± 2
$g_0 \pm \Delta g_0$	0.01 ± 0.00	0 ± 0.0
$R^2 (\%)$	98	99
<i>Elekta Precise 6 MV</i>		
$(A_1 \pm \Delta A_1)$	1.09 ± 0.05	1.8 ± 0.06
$(\mu_1 \pm \Delta \mu_1) \text{ mm}$	0.00 ± 0.01	0.00 ± 0.01
$(\sigma_1 \pm \Delta \sigma_1) \text{ mm}$	30.1 ± 0.4	80.4 ± 0.8
$A_2 \pm \Delta A_2$	8.3 ± 0.2	13.1 ± 1.6
$(\mu_2 \pm \Delta \mu_2) \text{ mm}$	0 ± 0.03	0.00 ± 0.01
$(\sigma_2 \pm \Delta \sigma_2) \text{ mm}$	69.2 ± 0.7	110 ± 3
$g_0 \pm \Delta g_0$	0.011 ± 0.003	0.0 ± 0.0
$R^2 (\%)$	99	99
<i>Elekta Precise 10 MV</i>		
$(A_1 \pm \Delta A_1)$	3.05 ± 0.04	1.04 ± 0.02
$(\mu_1 \pm \Delta \mu_1) \text{ mm}$	0 ± 0.1	0 ± 0.5
$(\sigma_1 \pm \Delta \sigma_1) \text{ mm}$	55.1 ± 0.4	125.4 ± 0.8
$A_2 \pm \Delta A_2$	7.9 ± 0.2	13.2 ± 0.5
$(\mu_2 \pm \Delta \mu_2) \text{ mm}$	0 ± 0.03	0 ± 0.1
$(\sigma_2 \pm \Delta \sigma_2) \text{ mm}$	108 ± 1	127 ± 1
$g_0 \pm \Delta g_0$	0.0070 ± 0.0001	0.0010 ± 0.0001
$R^2 (\%)$	99	99

tuées ont montré que les spectres en énergie normalisés correspondants aux champs d'irradiation de différentes formes ont des distributions statistiques comparables, seul le nombre de particules diffusées augmente en fonction de la taille du champ d'irradiation. Dans ce modèle, pour échantillonner une particule diffusée par le collimateur, il faut initialiser avant le commencement de la simulation le pourcentage de cette composante du faisceau. Les fonctions de la figure 5.5 permettront d'estimer la contribution du rayonnement diffusé en fonction de la surface du champ d'irradiation.

La méthode de reconstruction de la position et de la direction des particules diffusées est similaire à celle décrite pour le rayonnement primaire [Aboulbanine & El Khayati \(2018\)](#). La position initiale ou le point de départ d'une particule est échantillonnée à partir d'une distribution uniforme rectangulaire délimitée par les positions des mâchoires du collimateur, le point d'arrivée est généré à partir de la distribution

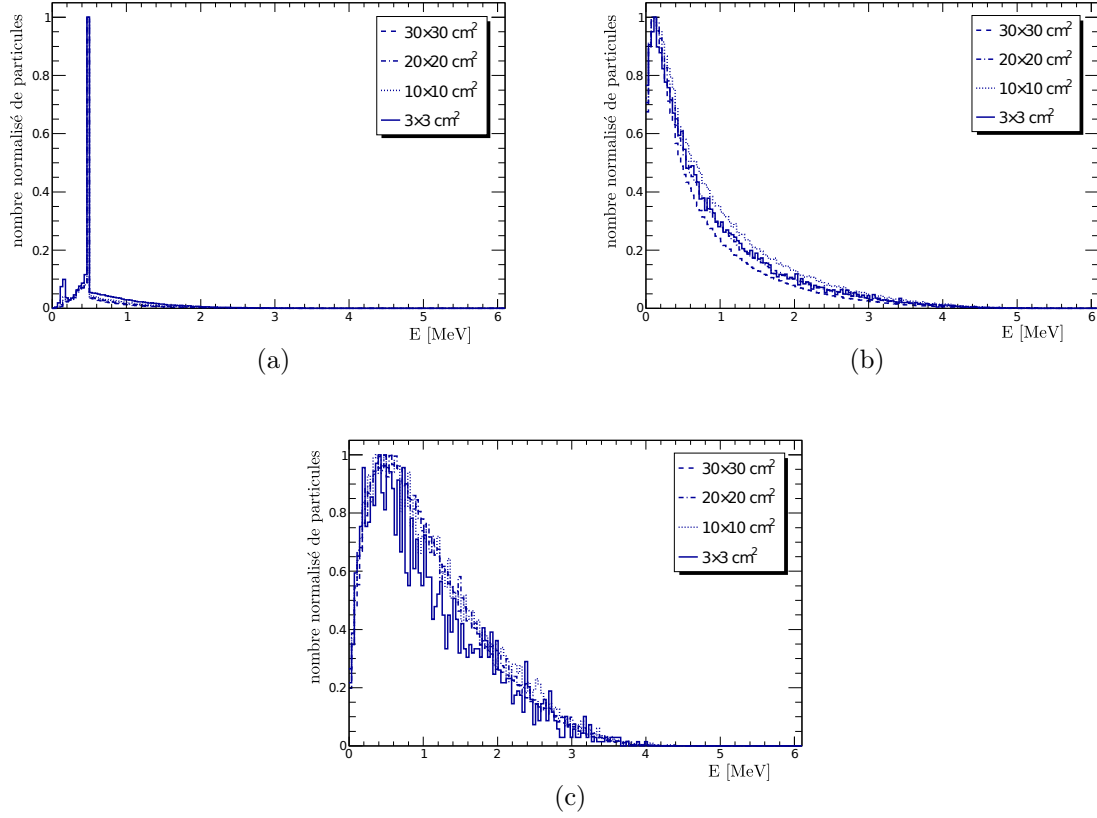


FIGURE 5.9: Spectres en énergie des particules diffusées par le collimateur secondaire pour quatre champs d'irradiation $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $20 \times 20 \text{ cm}^2$ et $30 \times 30 \text{ cm}^2$. (a) : photons ; (b) : électrons ; (c) : positrons

spatiale donnée par l'équation 5.13. L'énergie est échantillonnée de l'un des spectres en énergie obtenus pour le champ d'irradiation $20 \times 20 \text{ cm}^2$ montrés sur les figures 5.6 et 5.7.

Les contributions des quatre sources de rayonnement du modèle pour chacun des trois faisceaux de photons étudiés, sont présentées dans la table 5.4 :

TABLE 5.4: Composantes du modèle de faisceau de photons et contributions respectives. (*) : collimateur primaire ; (**) : filtre égalisateur.

Composantes du modèle	<i>TrueBeam</i> 6 MV	<i>Precise</i> 6 MV	<i>Precise</i> 10 MV
source primaire	85.6%	85.6%	84.6%
source (1) de diffusé (*)	5%	5%	5%
source (1) de diffusé (**)	9%	9%	10%
source (2) de diffusé	< 0.4%	< 0.4%	< 0.4%

5.2.2 Modélisation analytique du collimateur multilames

La méthode de reconstruction discutée dans la section précédente, permet à ce niveau de générer un faisceau de photons non collimaté. Généralement, un collimateur

multilames est placé en aval des composantes principales de la tête d'irradiation dans le cas d'une simulation complète, ou bien en dessous d'un générateur de particules qui peut être un espace des phases ou un MSV. L'inconvénient majeur de la simulation de l'atténuation des rayonnements pour collimater le faisceau, est lié au temps d'exécution perdu dans le transport des particules qui seront totalement absorbées dans les différentes composantes du collimateur. Le temps de simulation augmente parallèlement avec la surface cachée par le collimateur et inversement avec le seuil de production de particules secondaires dans cette partie de la géométrie.

Le collimateur multilames agit de la même manière qu'un filtre rectangulaire, il permet d'atténuer le faisceau à l'extérieur des limites du champ d'irradiation, la fluence à l'intérieur reste inchangée. Nous pouvons émuler cet effet par la multiplication de la fluence à l'entrée du collimateur par une simple fonction porte sur les deux axes (OX) et (OY) :

$$\Pi(x, x_a, x_b) = H(x - x_a) - H(x - x_b) \quad (5.16)$$

$H(x)$ est l'échelon unitaire appelé également fonction de *Heaviside*. En réalité la fonction de l'équation 5.16 est non adaptée pour décrire l'effet du collimateur puisqu'elle montre un gradient infini sur la limite du champ d'irradiation. Cependant, la fonction d'erreur et la fonction d'erreur complémentaire peuvent être utilisées pour modéliser les variations de la fluence sur les bords du collimateur. Ces deux fonctions sont paramétrées par deux variables $x^{a,b}$ et $w^{a,b}$; la première permet de décaler la fonction sur l'axe (OX), la deuxième permet de varier la largeur de la région à fort gradient.

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}\left(\frac{x - x^a}{w^a}\right) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x - x^a}{w^a}} \exp(-t^2) . dt \\ \operatorname{erfc}\left(\frac{x - x^b}{w^b}\right) &= 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x - x^b}{w^b}\right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Nous allons établir une fonction porte basée sur les expressions des fonctions d'erreur et erreur complémentaire :

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}\left(\frac{x - x^a}{w^a}\right) &: \mathbb{R} \rightarrow [-1, 1] \\ \operatorname{erfc}\left(\frac{x - x^b}{w^b}\right) &: \mathbb{R} \rightarrow [0, 2] \end{aligned} \quad (5.18)$$

donc :

$$\begin{aligned} f_1(x) &= \frac{1}{2} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{x - x^a}{w^a}\right) + 1 \right) , f_1 : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1] \\ f_2(x) &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x - x^b}{w^b}\right) , f_2 : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1] \end{aligned} \quad (5.19)$$

La multiplication des deux fonctions $f_1(x)$ et $f_2(x)$ eq.5.19 donne l'expression suivante :

$$f_1(x) . f_2(x) = \frac{1}{4} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{x - x^a}{w^a}\right) + 1 \right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - x^b}{w^b}\right) : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1] \quad (5.20)$$

Un paramètre c_{tr} est ajouté à l'expression de l'équation 5.20 pour prendre en consi-

dération la transmission à l'extérieur des limites du champ d'irradiation. Le facteur A_0 permet d'ajuster la fonction afin de conserver une valeur unitaire à l'intérieur et une valeur égale au coefficient de transmission c_{tr} à l'extérieur. Les fonctions $f_1(x)$, $f_2(x)$ et $f_3(x)$ sont dessinées séparément sur la figure 5.10 (a), $f_3(x)$ représente le coefficient de transmission c_{tr} .

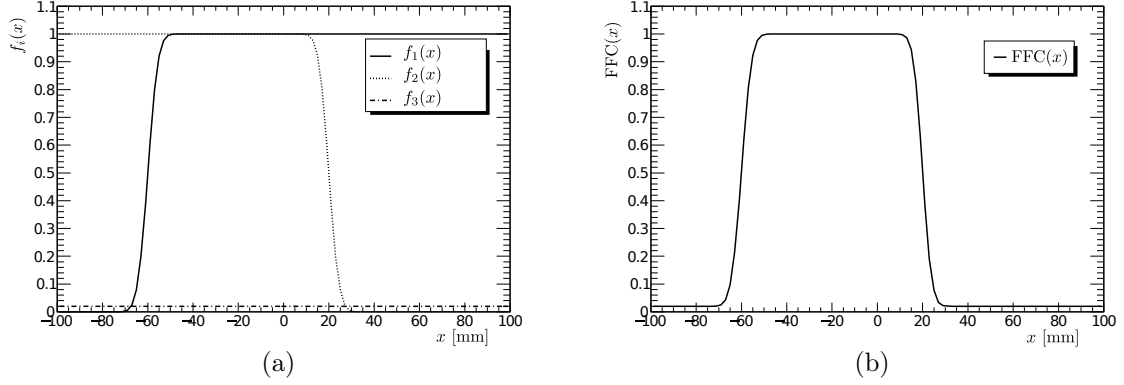


FIGURE 5.10: Fonction filtre collimateur. (a) : différentes fonctions composant la FFC. (b) : FFC, les paramètres pour cette illustration sont $A_1 = 1$, $A_0 = 0.98$, $x_i^a = -60$ mm, $w_i^a = 5$ mm, $x_i^b = 20$ mm, $w_i^b = 4.5$ mm et $c_{tr} = 0.02$.

L'expression finale de la FFC est écrite sous la forme :

$$\text{FFC}(x, x_i^a, x_i^b, w_i^a, w_i^b) = A_j \left(\frac{A_0}{4} \left(1 + \text{erf} \left(\frac{x - x_i^a}{w_i^a} \right) \right) \cdot \text{erfc} \left(\frac{x - x_i^b}{w_i^b} \right) + c_{tr} \right) \quad (5.21)$$

x : position sur l'axe (OX) de la distribution spatiale dérivée de l'espace des phases.
 A_0 : coefficient de normalisation de la FFC, sa valeur change en fonction du coefficient de transmission c_{tr} .

A_j : facteur de pondération des segments des champs d'irradiation de modulation d'intensité. Il faut noter que $\sum_{j=1}^N A_j = 1$, N est le nombre de segments. Dans le cas d'un champ d'irradiation unique $A_1 = 1$.

x_i^a, x_i^b : position de la i^{ieme} paire de lames ou de mâchoires sur l'axe (OX) et (OY), a et b indiquent la première et la deuxième lame ou mâchoire.

w_i^a, w_i^b : les largeurs respectives de la fonction d'erreur et la fonction d'erreur complémentaire en termes des positions de la i^{ieme} paire de lames ou mâchoires.

c_{tr} : coefficient de transmission.

La fonction FFC est caractérisée par trois régions distinctes eq.5.21 et fig.5.10, une région centrale d'intensité unitaire, une région à fort gradient de largeur w_i et une troisième région d'intensité égale au coefficient de transmission. Pour chaque paire de lames placée à (x_i^a, x_i^b) , la FFC est initialisée par les largeurs correspondantes (w_i^a, w_i^b) . Plusieurs simulations MC ont été effectuées pour étudier la variation de w_i en fonction de la position de la lame. Pour chaque simulation la lame centrale du collimateur a été placée à une position entre l'axe du faisceau et le bord du plus grand champ d'irradiation. Un ajustement de la fluence atténuée avec la fonction d'erreur eq.5.18, au voisinage de la position de la lame permettra d'estimer la variation de w_i en fonction de la position x_i de la lame. Le facteur d'échelle calculé en fonction des

paramètres géométriques (distance entre la cible et le plan de la fluence, l'épaisseur de la lame, distance entre la cible et l'isocentre), permet d'établir les projections des positions des lames et des mâchoires ainsi que la largeur virtuelle Δl_i d'une lame sur le plan de l'espace des phases fig.5.11.

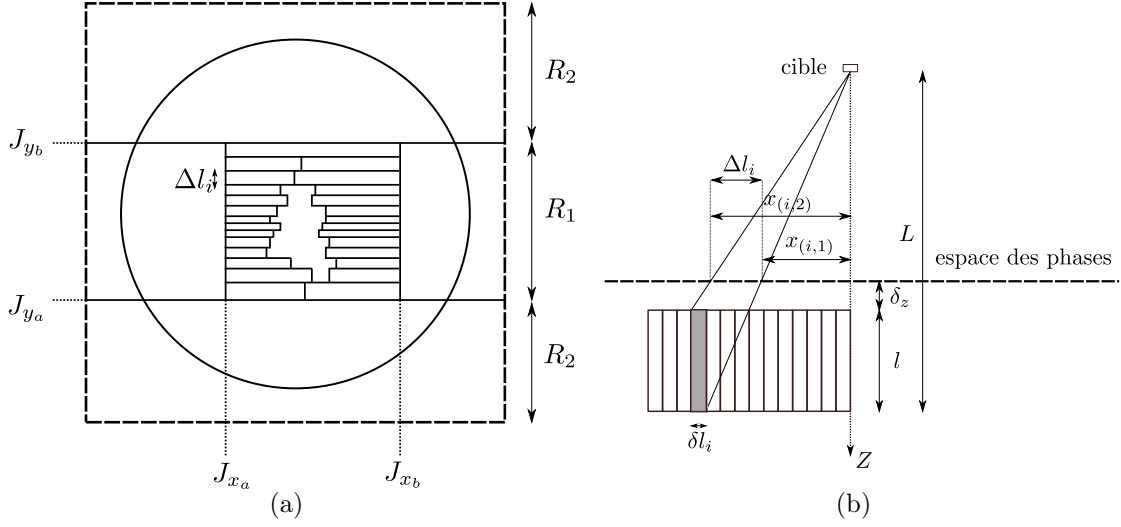


FIGURE 5.11: Collimation de la fluence de particules dérivée de l'espace des phases. (a) : Subdivision de la carte de fluence en deux régions, R_1 et R_2 . (b) : projections sur le plan de l'espace des phases en fonction des paramètres géométriques.

$$\Phi_F(x, y) = \begin{cases} \Phi(x, y) \cdot \text{FFC}(x, x_i^a, x_i^b, w_i^a, w_i^b) \cdot \text{FFC}(x, x_{J_{X_a}}, x_{J_{X_b}}, w_{J_{X_a}}, w_{J_{X_b}}) & J_{y_a} \leq y \leq J_{y_b} \\ \Phi(x, y) \cdot c_{tr}^2 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (5.22)$$

La fluence de l'espace des phases sera multipliée par la fonction de l'équation 5.22, la première partie de la fonction par morceaux permet d'émuler l'effet de l'intersection des mâchoires (J_{X_a}, J_{X_b}) avec les n_l paires de lames placées à différentes positions (x_i^a, x_i^b). Nous définissons la fluence filtrée de la région R_1 fig.5.11 (a) par le produit de deux FFC et la distribution spatiale de l'espace des phases. La deuxième région R_2 de la carte de fluence filtrée, reproduit la faible transmission à travers les mâchoires orthogonales (J_{Y_a}, J_{Y_b}).

La fluence filtrée résultante $\Phi_F(x, y)$ eq.5.22 sera utilisée pour la reconstruction directe des particules du faisceau collimaté, suivant les étapes décrites dans les sections antérieures. Une rotation du collimateur d'un angle ω autour de son axe sera traduite analytiquement par une transformation linéaire eq.5.23 appliquée au point échantillonné de la fluence filtrée.

$$\begin{bmatrix} x_\omega \\ y_\omega \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\omega) & -\sin(\omega) \\ \sin(\omega) & \cos(\omega) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

(x, y) : coordonnées cartésiennes d'un point échantillonné à partir de la fluence filtrée.
 (x_ω, y_ω) : coordonnées du point échantillonné après l'application d'une rotation d'un angle ω autour de l'axe (OZ).

Des outils de la bibliothèque d'analyse de données ROOT Brun & Rademakers (1997)

ont été utilisés pour implémenter une classe $\mathbb{C}^{++}$ introduite dans notre code basé sur le package **Geant4**, afin de tester et valider le présent modèle.

5.2.3 Validation

Le processus de validation est subdivisé en deux étapes principales. Dans la première phase la qualité de reconstruction a été évaluée. Dans la deuxième phase les distributions de dose du modèle ont été comparées avec les distributions de dose de référence calculées avec les espaces des phases de l'AIEA.

Un nombre de 10^4 particules a été lancé à partir de l'espace des phases pour construire les histogrammes 2D corrélés, obtenus à l'isocentre. Ces distributions vont servir de données de référence pour la comparaison. Les combinaisons étudiées dans cette analyse sont $h_{(E,R)}$, $h_{(\phi,R)}$, $h_{(\phi,E)}$ et $h_{(\psi,\theta)}$. La même procédure a été suivie pour calculer les histogrammes corrélés du faisceau reconstruit par le modèle.

La précision de la reconstruction a été évaluée par analyse de la distribution de différence normalisée S eq.5.24, utilisée pour estimer le degré de ressemblance entre deux histogrammes unidimensionnels Bityukov et al. (2016). La distribution S a été calculée pour cinq histogrammes 1D, le spectre énergétique du faisceau h_E ; les distributions angulaires h_ϕ , h_ψ et les distributions spatiales h_R , h_θ . La valeur moyenne $\langle S \rangle$ et l'écart type σ_S ont été déterminées pour chaque densité de probabilité.

$$S_i = \frac{n_{i,1} - K.n_{i,2}}{\sqrt{\sigma_{i,1}^2 + K^2.\sigma_{i,2}^2}} \quad (5.24)$$

$n_{i,j}$ et $\sigma_{i,j}$ sont respectivement le nombre d'événements et l'erreur correspondante au canal i de l'histogramme j . $K = N_1/N_2$ est le coefficient de normalisation, $N_{1,2}$ est le nombre total d'observation dans chaque histogramme.

La conservation de la corrélation entre deux variables a été estimée par le calcul de la valeur moyenne d'une première variable en fonction d'une deuxième variable. Quatre combinaisons ont été étudiées : l'angle de diffusion moyen en fonction de la position radiale et de l'énergie de la particule respectivement $\langle \phi \rangle (R)$ et $\langle \phi \rangle (E)$; l'énergie moyenne en fonction de la position radiale $\langle E \rangle (R)$ et aussi la valeur moyenne de l'angle de direction en fonction de la position en coordonnées polaire $\langle \psi \rangle (\theta)$. La similarité entre les fonctions corrélées du faisceau de l'espace des phases et du faisceau reconstruit par le modèle a été estimée par le calcul de la valeur moyenne $\langle x \rangle$ et de l'écart type σ de la distribution d'erreur relative.

Le calcul de la quantité $\langle y \rangle (x)$, valeur moyenne d'une variable aléatoire y en termes d'une deuxième variable aléatoire x est basé sur l'histogramme 2D $h_{(x,y)}$ traduisant la corrélation entre les deux variables x et y . Nous considérons N_x et N_y respectivement le nombre de canaux sur les axes (OX) et (OY). La valeur moyenne de la distribution y du i^{ieme} canal sur l'axe (OX) est donnée par l'équation 4.4.

Les distributions de dose de référence ont été calculées dans un fantôme voxelisé d'eau. La validation du modèle a été effectuée pour les trois espaces des phases

Elekta Precise 6/10 MV et *Varian TrueBeam* 6 MV. L'isocentre a été placé à la surface du fantôme d'eau. Plusieurs tailles et configurations de champ d'irradiation ont été considérées, $3 \times 3 \text{ cm}^2$, $10 \times 10 \text{ cm}^2$, $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et un champ rectangulaire asymétrique $20 \times 7 \text{ cm}^2$. La validation inclut également un champ de modulation d'intensité composé de sept segments fig.5.16, générés par un programme que nous avons élaboré. Une analyse γ_{index} tridimensionnelle a été effectuée pour les critères 3%/3 mm et 2%/2 mm [Low et al. \(1998\)](#).

5.2.4 Évaluation de l'efficacité

L'efficacité du calcul est estimée en termes du nombre d'événements simulés par unité de temps. Nous allons définir le facteur d'efficacité par le rapport des vitesses de calcul du modèle proposé et des espaces des phases de l'AIEA. Pour calculer ce facteur, l'espace des phases a été placé au-dessus du collimateur multilames fig.5.4, le plan de détection est à l'isocentre. L'incorporation du processus de collimation dans le formalisme du modèle à travers l'émulation de son effet par la FFC, permet d'éviter la simulation du transport de particules dans les composantes du collimateur multilames. Le débit de fluence moyenne a été calculé pour chaque configuration de champ d'irradiation, cette quantité est définie par la formule suivante :

$$r[\text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}] = \frac{n}{a \cdot t} \quad (5.25)$$

n est le nombre de particules passant à travers la surface a située à l'isocentre durant le temps t .

5.2.5 Paramètres de simulation

Les simulations MC effectuées dans le cadre de ce travail ont été réalisées avec le code **Geant4** en mode **multi-threading**. Les distributions de dose des faisceaux 6/10 MV ont été calculées dans un fantôme de dimension $45.0 \times 45.0 \times 25.0 \text{ cm}^3$ avec un voxel de taille 2 mm^3 . Un seuil de production de particules secondaires de 0.5 mm est appliqué dans l'eau. La liste des processus physiques électromagnétiques option 3 **G4EmStandardPhysics_option3** a été utilisée dans toutes les simulations.

Chaque calcul indépendant a été subdivisé en 10 batches indépendants. L'incertitude statistique correspondant à chaque voxel du fantôme a été calculée par la méthode *history by history* [Kawrakow & Walters \(2006\)](#).

Le modèle discuté dans ce chapitre a été implémenté à travers une classe **C++** compatible avec notre code de simulation **Geant4**. Les étapes de reconstruction du faisceau généré avec le présent modèle sont résumées dans la liste suivante :

1. Charger les histogrammes dans la mémoire.
 - spectres énergétiques (1D).
 - fluence de particules (2D).
2. Filtrer la fluence.

3. Calculer le pourcentage de rayonnements diffusés en fonction de la taille du champ.
4. Initialiser le nombre d'événements simulés N .
5. Initialiser le compteur d'événement $i=0$;
6. tant que $i < N$, début
 - (a) générer une particule
 - échantillonner la position initiale.
 - calculer la direction.
 - définir le spectre énergétique correspondant.
 - échantillonner l'énergie.
 - (b) simuler le transport de la particule dans l'eau.
 - (c) incrémenter i , fin

Le choix du nombre d'applications parallèles (**threads**) lancées durant l'exécution est basé sur un travail antérieur, montrant que 10 applications simultanées assurent la meilleure efficacité pour notre configuration matérielle.

5.3 Résultats

5.3.1 Qualité de reconstruction

Les résultats de la figure 5.12 montrent la reconstruction des distributions statistiques de certaines variables du faisceau 6 MV du linac *Elekta Precise*. Les incertitudes statistiques du calcul sont inférieures à 4%.

TABLE 5.5: Moyenne et écart type de la distribution de différence normalisée pour les trois faisceaux de photons étudiés.

	<i>Elekta Precise</i> 6 MV		<i>Elekta Precise</i> 10 MV		<i>Varian TrueBeam</i> 6 MV	
	$\langle S_i \rangle$	σ_{S_i}	$\langle S_i \rangle$	σ_{S_i}	$\langle S_i \rangle$	σ_{S_i}
h_E	0.06	0.04	0	0.001	0.002	0.002
h_ϕ	0	0.001	0	0.01	0.003	0.001
h_R	0	0	0	0.002	0.002	0.002
h_ψ	0.001	0	0	0.001	0.002	0
h_θ	0.001	0	0	0.001	0.002	0

Les valeurs moyennes $\langle S \rangle$ et écart type σ_S de la distribution de différence normalisée sont toutes en voisinage de zéro. Ce résultat confirme à ce niveau une bonne qualité de reconstruction (fig.5.12 (a,b) ; tab.5.5). La moyenne maximale $\max(\langle S \rangle)$ est inférieure à 0.06, avec un écart type de 0.04 obtenu pour le spectre en énergie h_E tab.5.5.

Les résultats de l'analyse de la conservation des corrélations entre deux variables sont résumés dans la table 5.6. La valeur moyenne de la distribution d'erreur relative fluctue autour de zéro avec un écart type de 0.04 fig.5.12, tab.5.6. Nous pouvons expliquer la seule différence notable observée sur le graphique $\langle E \rangle(R)$, pour

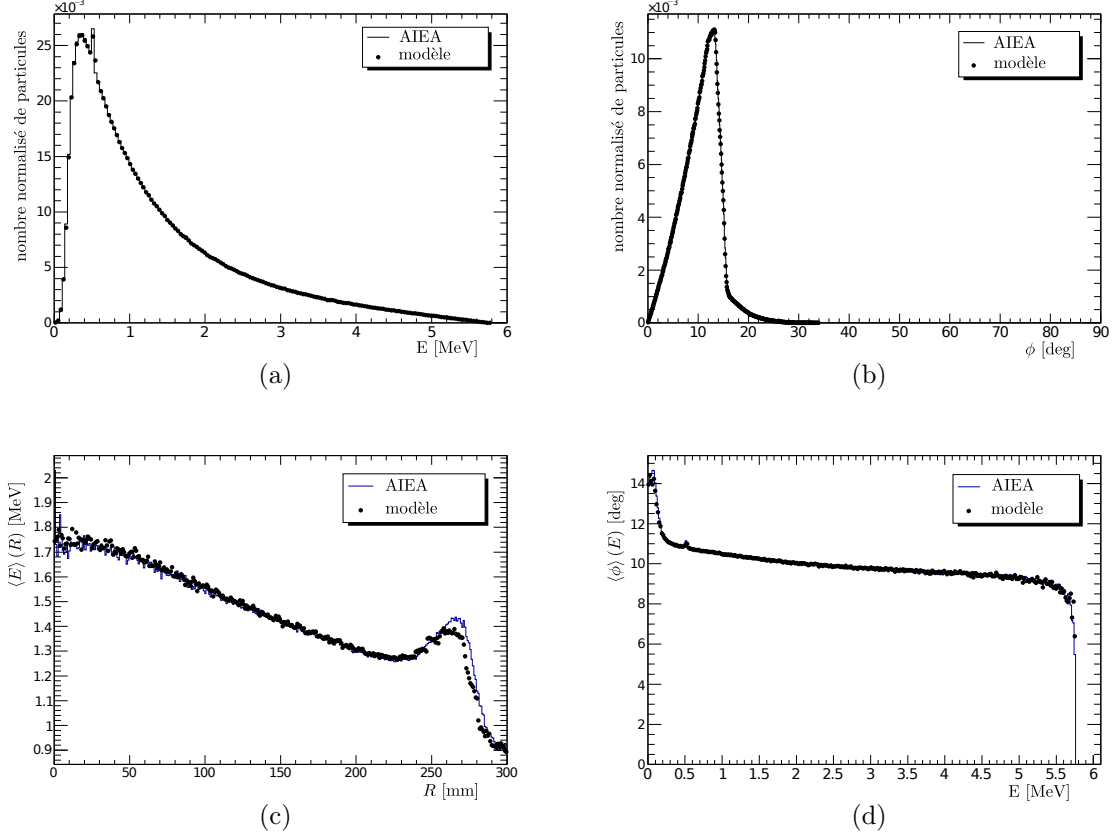


FIGURE 5.12: Reconstruction de l'espace des phases du faisceau *Elekta Precise* 6 MV à l'isocentre. (a) : spectre énergétique total h_E normalisé par le nombre total de particules simulées. (b) : distribution de l'angle de diffusion h_ϕ normalisée par le nombre total de particules simulées. (c) : énergie moyenne des photons $\langle E \rangle (R)$ en fonction de la position radiale. (d) : angle de diffusion moyen des photons $\langle \phi \rangle (E)$ en fonction de l'énergie de la particule.

TABLE 5.6: Moyenne et écart type de la distribution d'erreur relative pour les trois faisceaux de photons étudiés.

	<i>Elekta Precise</i> 6 MV		<i>Elekta Precise</i> 10 MV		<i>Varian TrueBeam</i> 6 MV	
	$\langle x \rangle$	σ	$\langle x \rangle$	σ	$\langle x \rangle$	σ
$\langle E \rangle (R)$	0.002	0.02	0.006	0.01	0.001	0.02
$\langle \phi \rangle (R)$	0.006	0.04	-0.01	0.005	0.01	0.04
$\langle \phi \rangle (E)$	-0.02	0.04	-0.01	0.01	0.003	0.01
$\langle \psi \rangle (\theta)$	-0.002	0.02	0	0.003	-0.002	0.02

$R > 260$ mm fig.5.12 (c) par la faible statistique sur les bords de l'espace des phases.

La reconstruction du faisceau de photons pour ce modèle est basée sur la caractérisation des variables fortement corrélées, à savoir l'angle de diffusion ϕ et la position radiale, l'énergie et l'angle de diffusion d'une particule [Aboulbanine & El Khayati \(2018\)](#). La variable ϕ joue un rôle central dans le formalisme du modèle et permet de réduire la quantité de données extraite de l'espace des phases pour faire la reconstruction.

Généralement, le modèle développé assure une bonne qualité de reconstruction et conserve avec suffisamment de précision les corrélations caractéristiques des trois faisceaux de photons étudiés dans ce travail.

5.3.2 Calcul de dose

Une analyse γ_{index} 3D a été effectuée pour évaluer les distributions de dose du modèle [Low et al. \(1998\)](#), calculées dans un fantôme d'eau. Deux critères d'évaluation ont été considérés 3%/3 mm et 2%/2 mm. Les résultats de l'analyse pour quatre champs d'irradiation réguliers et un champ de modulation d'intensité sont résumés dans le tableau 5.7.

TABLE 5.7: Évaluation des distributions de dose par analyse γ_{index} 3D. Pourcentage de points passant avec succès les critères 2%/2 mm et 3%/3 mm calculé pour chaque champ d'irradiation et énergie nominale de faisceau.

faisceau	critère	taille de champ [cm ²]					
		3 × 3	4 × 4	10 × 10	20 × 7	30 × 30	IMRT
<i>Precise</i> 6 MV	2%/2 mm	99.9	99.9	99.9	99.4	95.6	98.5
	3%/3 mm	100	100	100	99.9	99.4	99.7
<i>Precise</i> 10 MV	2%/2 mm	99.9	99.9	97.8	96.3	93.3	–
	3%/3 mm	100	100	99.5	98.9	98.5	–
<i>TrueBeam</i> 6 MV	2%/2 mm	99.9	99.4	98.3	98.2	96.7	97.9
	3%/3 mm	100	99.7	99.6	99.6	99.8	99.4

Les distributions de dose de référence ont été calculées avec les faisceaux des espaces des phases de l'AIEA collimatés par le dispositif de la figure 5.2. Les incertitudes statistiques obtenues pour ces calculs sont inférieures à 2%.

Le pourcentage de points passant avec succès le critère γ_{index} ($\gamma < 1$) est calculé pour chaque champ d'irradiation et énergie de faisceau. Un accord satisfaisant a été obtenu pour les critères 2%/2 mm et 3%/3 mm. Le taux de succès est plus de 98% pour le critère 3%/3 mm et il est supérieur à 93% pour le 2%/2 mm. Ces deux dernières valeurs ont été observées dans le cas du champ large 30 × 30 cm² pour l'énergie nominale 10 MV.

Le pourcentage de rayonnement diffusé, les paramètres géométriques du collimateur primaire et du filtre égalisateur figs.5.1 te 5.3 décrits par les équations 5.7 et 5.8 peuvent améliorer ce résultat. Les courbes de rendement en profondeur et profile de dose tracées à trois profondeurs respectives d_{max} , 10 cm et 20 cm sont normalisées sur la dose de la profondeur 10 cm figs.5.14 à 5.15.

Les résultats de l'analyse γ_{index} des distributions de dose du petit champ 3 × 3 cm², du champ moyen 10 × 10 cm² et du champ asymétrique 20 × 7 cm² sur la table 5.7 ont montré qu'au moins 96% et 99% des voxels évalués ont passé avec succès le test respectivement pour les critères 2%/2 mm et 3%/3 mm. Il faut noter que la précision du modèle est très peu dépendante de la qualité du faisceau. Le champ d'irradiation

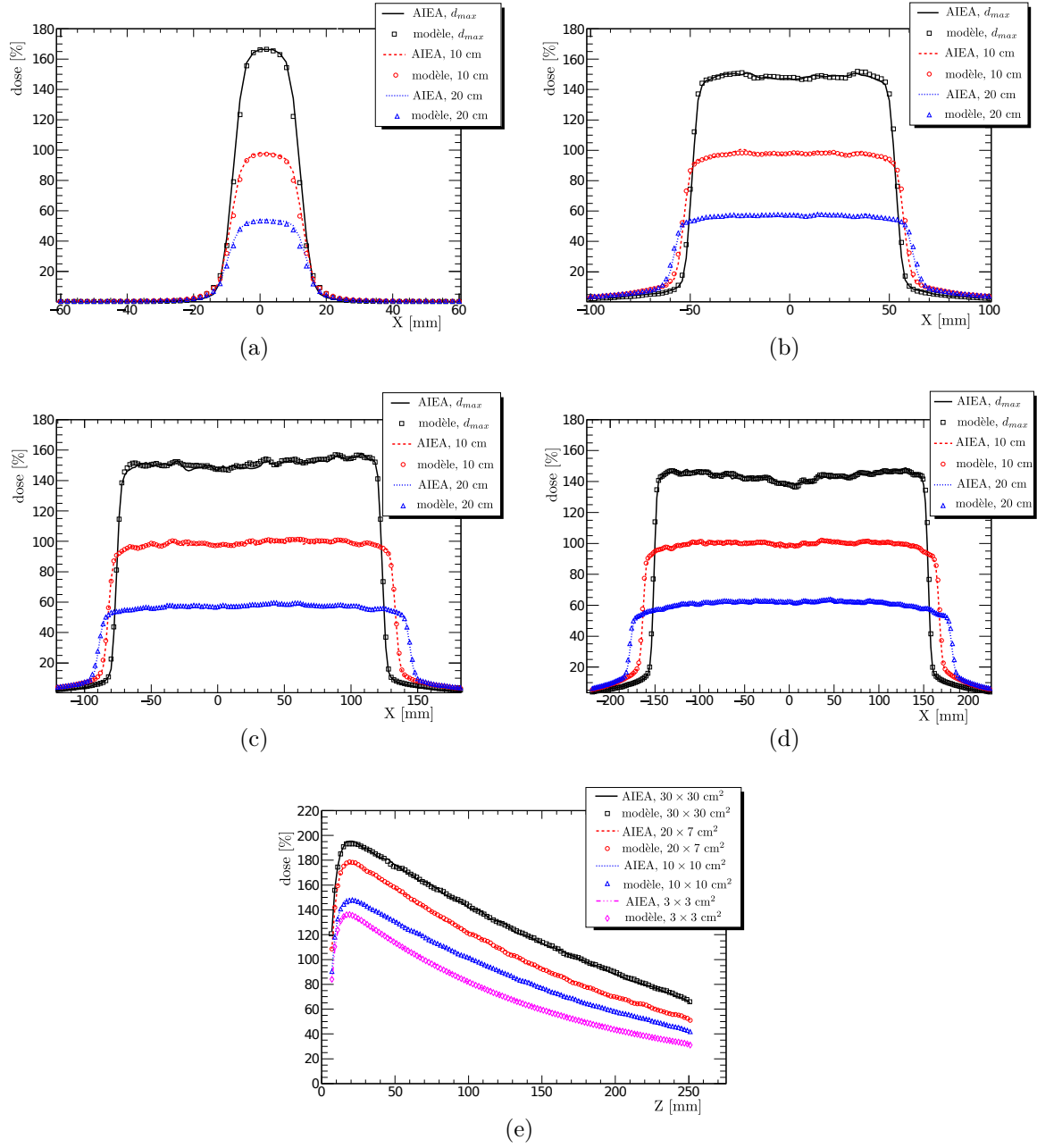


FIGURE 5.13: Distribution de dose du faisceau *Elekta Precise* 6 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.

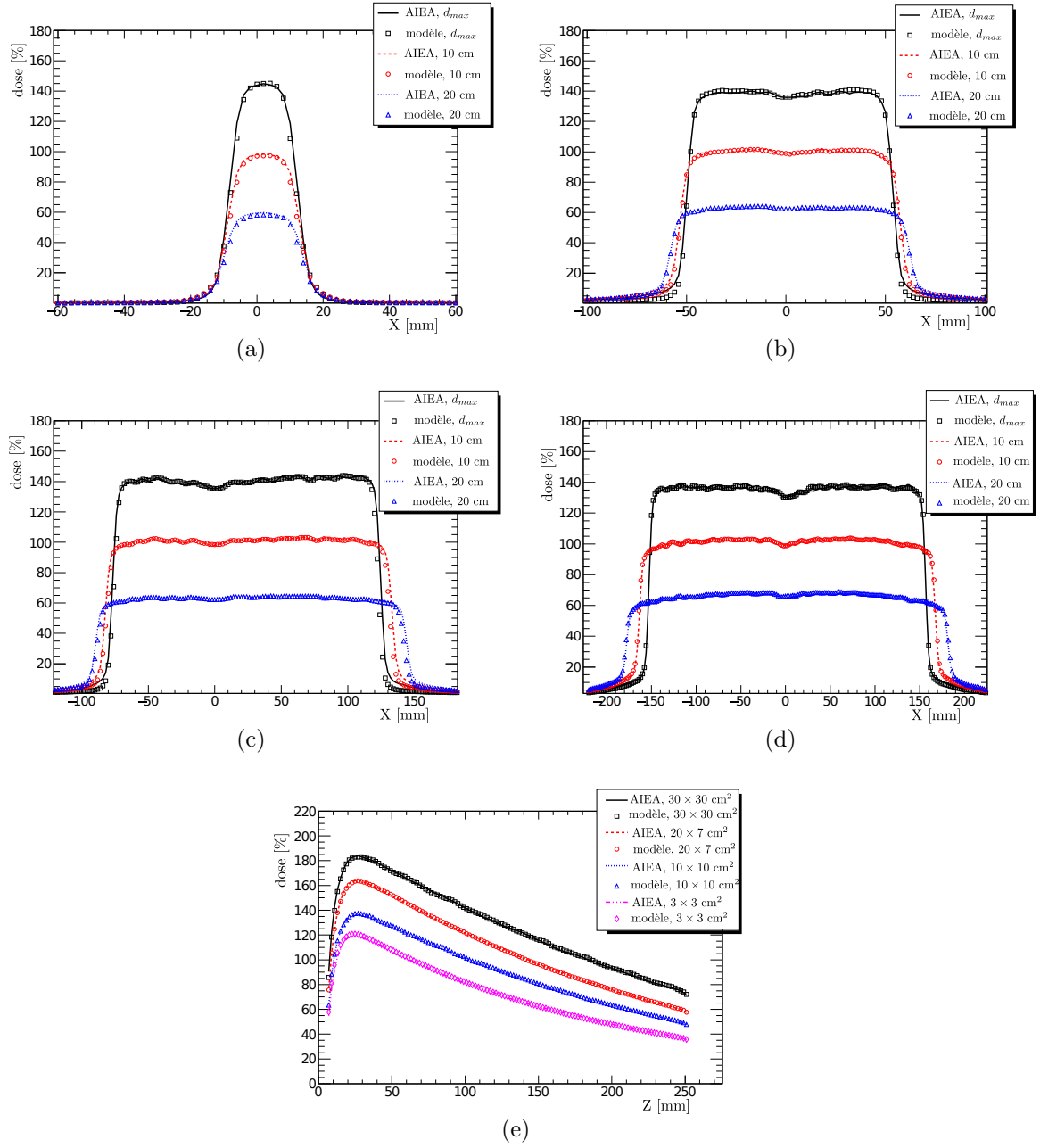


FIGURE 5.14: Distribution de dose du faisceau *Elekta Precise* 10 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.

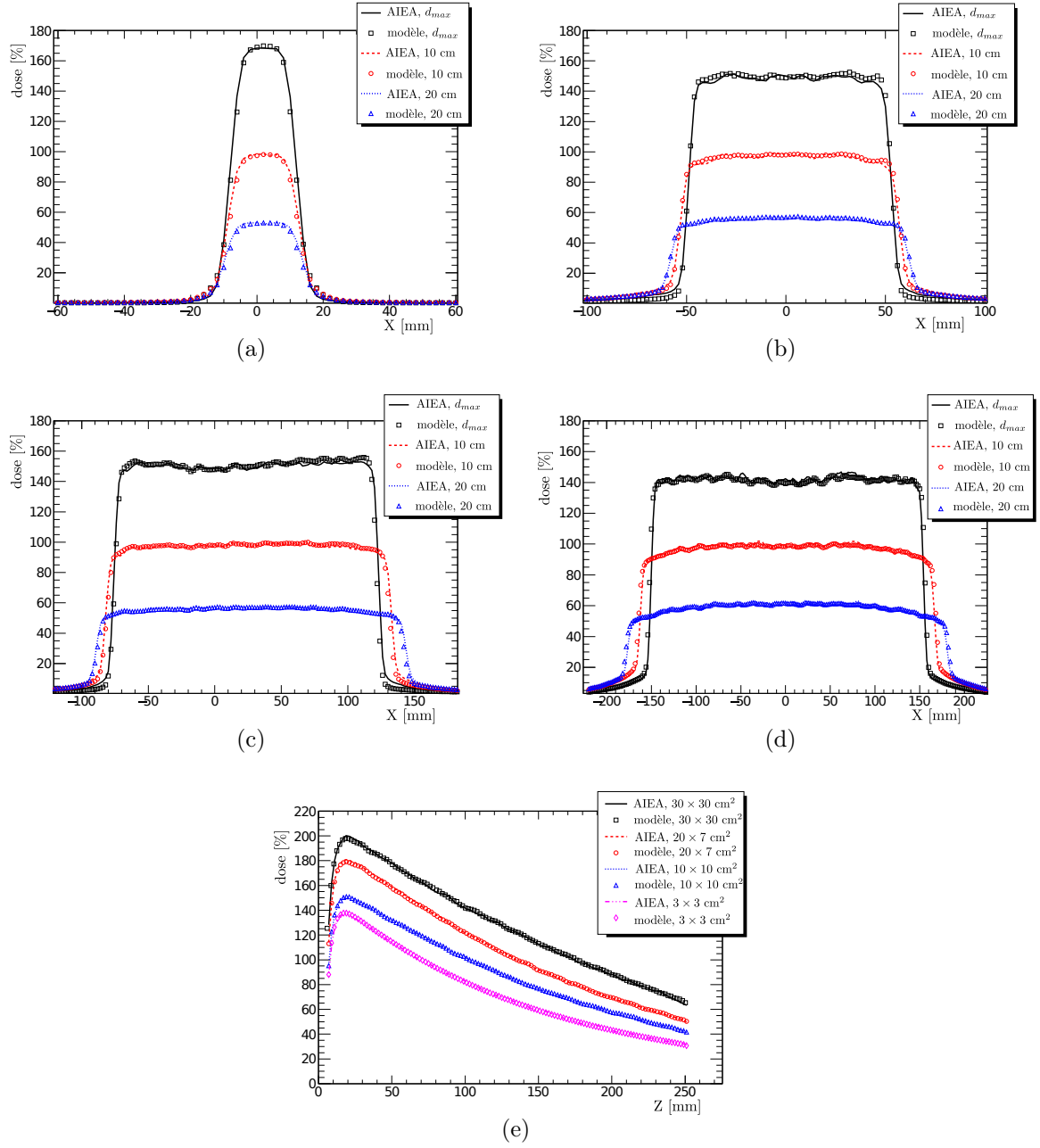


FIGURE 5.15: Distribution de dose du faisceau *Varian TrueBeam* 6 MV pour quatre champs d'irradiation réguliers. (a) : $3 \times 3 \text{ cm}^2$; (b) : $10 \times 10 \text{ cm}^2$; (c) : $20 \times 7 \text{ cm}^2$; (d) : $30 \times 30 \text{ cm}^2$ et (e) : rendement en profondeur sur l'axe du faisceau.

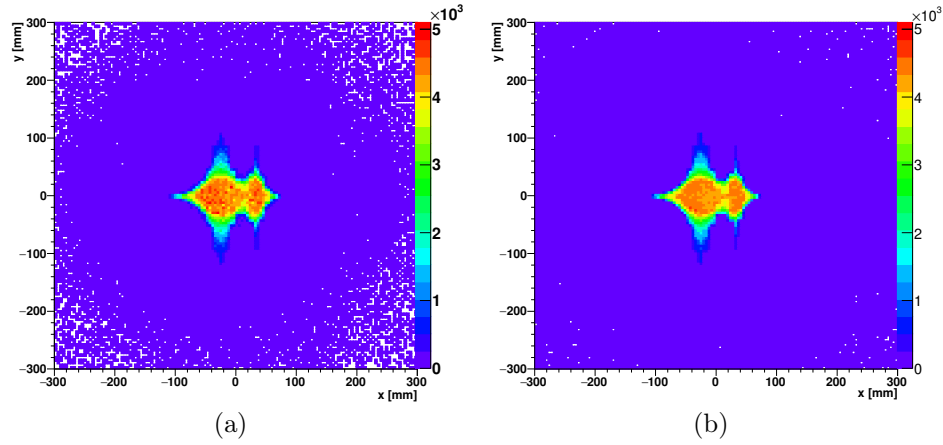


FIGURE 5.16: Carte de fluence du champ d'irradiation modulé utilisé dans la validation du modèle de faisceau. (a) : fluence de l'espace des phases de l'AIEA. (b) : fluence reconstruite avec le modèle élaboré.

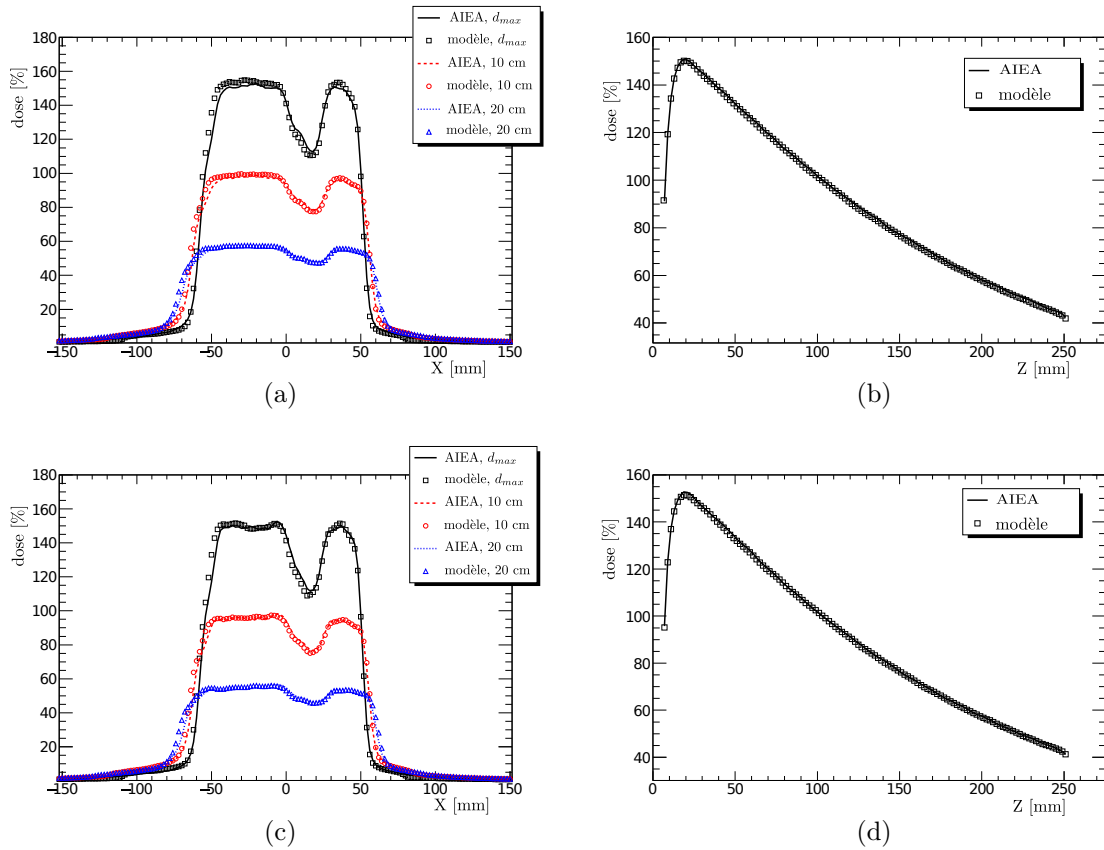


FIGURE 5.17: Distribution de dose correspondante au champ de modulation d'intensité fig.5.16. (a,c) courbes de profile de dose à 6 cm de l'axe du faisceau ; (b,d) rendement en profondeur à l'axe du faisceau. (a,b) : *Elekta Precise* 6 MV ; (c,d) : *Varian TrueBeam* 6 MV.

$30 \times 30 \text{ cm}^2$ représente l'unique exception avec 93% de points satisfaisant le critère 2%/2 mm. La majorité des points qui ont échoué le test sont situés sur les bords du disque d'évaluation γ_{index} .

Un bon accord a été obtenu pour la distribution de dose du champ de modulation d'intensité figs.5.16 et 5.17. 97% des voxels du fantôme ont passé avec succès le test 2%/2 mm pour les deux faisceaux évalués tab.5.7. La figure 5.17 montre les courbes de profile de dose et rendement en profondeur correspondantes.

Généralement, l'analyse γ_{index} des distributions de dose a confirmé la précision du modèle pour le critère d'évaluation 2%/2 mm. Les résultats obtenus n'ont pas été influencés par la qualité du faisceau ou la profondeur de calcul. Il est aussi important de noter que l'accord entre les distributions de dose des champs d'irradiation évalués confirment la validité de la FFC eq.5.21 développée pour émuler le collimateur mulilames.

5.3.3 Évaluation de l'efficacité

Les résultats de la table 5.8 indiquent une claire dépendance entre le débit de fluence et la taille du champ d'irradiation dans le cas des espaces des phases de l'AIEA r_{aiea} eq.5.25 couplés avec un collimateur multilames. La vitesse de calcul varie inversement en fonction de la surface couverte du champ d'irradiation. Cependant, le débit de fluence du modèle $r_{modèle}$ se montre très peu dépendant de la configuration du champ d'irradiation.

Le gain d'efficacité que nous définissons par le rapport de $r_{modèle}/r_{aiea}$, atteint $\times 491$ obtenu pour le petit champ de taille $4 \times 4 \text{ cm}^2$. La valeur minimale du gain est égale à 4, calculée dans le cas du grand champ $30 \times 30 \text{ cm}^2$. Pour le champ de modulation d'intensité composé de sept segments élémentaires fig.5.16, le rapport est de l'ordre $\times 43$.

TABLE 5.8: Efficacité de calcul du modèle de faisceau de photons élaboré en fonction du débit de fluence.

taille de champ [cm^2]	$r_{modèle}$ [$\text{s}^{-1}.\text{cm}^{-2}$]	r_{aiea} [$\text{s}^{-1}.\text{cm}^{-2}$]	rapport
4×4	196.3	0.4	491
10×10	183.2	4.2	44
20×7	182.5	5.6	33
30×30	179.8	50.4	4
IMRT	173.9	4.0	43

5.4 Conclusion

L'objectif de ce travail est l'amélioration de l'efficacité du modèle de source virtuelles présenté dans le chapitre précédant. Des changements majeurs ont été apportés principalement à la méthode de reconstruction. La collimation du faisceau est effectuée

à travers un modèle mathématique décrit par la “Fonction Filtre Collimateur” que nous avons élaboré. Cette fonction permettra d’émuler l’effet du collimateur et accélérer sensiblement la génération d’un faisceau de photons collimaté.

Une évaluation des distributions de dose du modèle a été effectuée suivant le formalisme du γ_{index} . Les distributions de dose de référence ont été calculées avec les espaces des phases de l’AIEA. Quatre champs d’irradiation réguliers de taille croissante et un champ de modulation d’intensité sont considérés dans cette validation. Le modèle proposé a été testé pour trois faisceaux de photons différents *Elekta Precise* 6/10 MV et *Varian TrueBeam* 6 MV. Le dépôt de dose dans un fantôme d’eau est calculé par le code MC **Geant4**-[mt].

L’analyse γ_{index} 3D de l’ensemble des distributions de dose évaluées pour le critère 2%/2 mm a montré que le pourcentage de points passant avec succès le test est supérieur à 93%, étendre le critère à 3%/3 mm augmente la probabilité de succès à plus de 98%. Une analyse de l’efficacité du calcul a montré qu’une simulation du champ modulé avec le modèle élaboré est $\times 43$ plus rapide qu’une simulation standard avec l’espace des phases et un collimateur multilames. Le gain maximal en termes de rapidité est $\times 491$ pour le petit champ $4 \times 4 \text{ cm}^2$.

Conclusion

L'estimation de l'énergie déposée par un rayonnement ionisant dans le corps humain suite à une exposition professionnelle ou thérapeutique représente depuis de nombreuses années l'objectif de plusieurs études et travaux de recherche scientifiques. Particulièrement en radiothérapie externe, l'efficacité du traitement par rayonnement ionisant est conditionnée par le degré de conformité entre la distribution de dose planifiée et celle délivrée réellement. L'étape de la planification de traitement est indispensable en radiothérapie moderne, la distribution de dose est calculée dans un fantôme virtuel du patient représenté par des coupes scanner. Les méthodes de calcul de dose analytiques ou hybrides sont les plus utilisées de nos jours, elles permettent un calcul relativement rapide mais qui peut manquer de précision sous certaines conditions liées à la taille du champ d'irradiation et à la nature du milieu irradié. Parallèlement, la méthode de Monte Carlo, largement utilisée dans différents domaines d'application, montre une précision nettement supérieure mais au prix d'un temps d'exécution plus long.

L'objectif de cette thèse est d'optimiser la simulation Monte Carlo des accélérateurs linéaires médicaux à travers le développement d'un modèle de sources virtuelles (MSV). Ce genre de modèle ne nécessite pas la description des composantes de la géométrie détaillée de la tête d'irradiation d'un linac, nécessaire pour simuler la production d'un faisceau de photons suivant l'approche classique.

Dans la première partie, le modèle proposé est décomposé en deux sources virtuelles, une source de rayonnement primaire et une source de rayonnement diffusé. La conception de chaque source est basée sur une analyse des espaces des phases de l'AIEA. Les corrélations entre les variables décrivant l'état d'une particule dans l'espace des phases sont étudiées. L'analyse a confirmé la forte corrélation entre la position, la direction et l'énergie d'une particule. Sur la base de ce résultat, des spectres en énergie corrélés et des distributions angulaires et distributions spatiales sont extraits des espaces des phases de l'AIEA pour permettre une reconstruction du faisceau. Le modèle a été validé pour trois espaces des phases, pour chaque faisceau les distributions de dose dans l'eau ont été calculées pour des champs d'irradiation de différentes tailles. La méthodologie présentée dans ce travail permet de dériver un modèle de sources virtuelles à partir d'un espace des phases validé pour reconstruire par la suite le faisceau en amont du collimateur multilames sans avoir recours à une simulation complète de la tête d'irradiation du linac.

Dans la deuxième partie, plusieurs améliorations ont été proposées. Des changements majeurs ont été apportés à la méthode de reconstruction afin de minimiser la quantité de données utilisée dans la reconstruction du faisceau. La collimation est

effectuée à travers un modèle mathématique que nous avons appelé Fonction Filtre du Collimateur, permettant d’émuler l’effet du collimateur multilames sur la fluence des particules pour faire une reconstruction directe d’un faisceau collimaté. Cette dernière fonction a sensiblement amélioré l’efficacité du calcul. De la même manière, la nouvelle version du modèle a été validée pour trois faisceaux d’espace des phases, la procédure de validation a été divisée en deux étapes, dans la première phase la qualité de reconstruction a été évaluée ; dans la deuxième phase les distributions de dose dans l’eau du faisceau reconstruit et du faisceau original ont été comparées.

Après avoir défini les concepts de base du modèle de sources virtuelles développé durant cette thèse, il a été testé et validé sous le code de calcul Monte Carlo à licence libre **Geant4** en mode d’exécution parallèle (**multi-threading**). Le MSV a été élaboré sous forme d’une classe **C++** permettant de charger les données d’entrée du modèle sur la mémoire vive, faire la reconstruction de chaque source virtuelle et de gérer et libérer la mémoire allouée par les différents objets instanciés durant l’exécution. La manipulation des espaces des phases de l’AIEA dans la simulation a été effectuée à travers une deuxième classe que nous avons développée en **C++**, en nous basant sur les fonctions de lecture/écriture mises à la disposition des utilisateurs par l’AIEA. L’implémentation de cette classe nous a permis principalement une exécution fluide et compatible avec le mode **multi-threading**. Une troisième classe **C++** développée pour ce travail permet de gérer l’accumulation et la sauvegarde des informations d’intérêt sous forme de fichiers de sortie **ROOT** pour chaque simulation. Ces fichiers d’extension **.root** comportent des histogrammes 2D reconstruits à l’isocentre pour différentes combinaisons de variables et une matrice 3D de l’énergie déposée dans un fantôme voxelisé d’eau.

De bons résultats ont été obtenus en termes de qualité de reconstruction du faisceau généré par le MSV. L’évaluation par comparaison de distributions de dose dans l’eau en matière du critère d’évaluation $\gamma_{2\%/2\text{ mm}}$, pour plusieurs champs d’irradiation réguliers et un champ de modulation d’intensité, a confirmé la validité du modèle proposé dans le cadre de cette thèse.

L’objectif initial de cette thèse étant atteint, l’étape de validation par comparaison avec des mesures expérimentales afin de rendre la méthode cliniquement opérationnelle est en cours de réalisation. Le couplage du modèle proposé avec un code Monte Carlo rapide pourrait éventuellement constituer le noyau d’un système de planification de traitement d’une efficacité et précision remarquables.

Annexe A

γ index

A.1 Concept

Le moyen le plus facile pour comparer deux distributions de dose uni-dimensionnelle, bi-dimensionnelle ou tri-dimensionnelle, consiste à calculer l'écart en tout point et fixer un seuil de tolérance acceptable, pour estimer l'accord. Cette approche basique montre un inconvénient majeur dans les régions à fort gradient de dose. Dans cette situation, un écart spatial infinitésimal entre le point de référence et le point d'évaluation, peut mener à une large différence en termes de dose, pouvant induire par conséquent une évaluation faussée et non adaptée.

À la lumière de cette dernière considération concernant les zones à forte variation de dose, *Van Dyk et al.* propose de calculer l'écart spatial entre les deux distributions, souvent noté DTA *Distance To Agreement*. La DTA représente tout simplement la distance horizontale séparant le point de référence du point évalué ayant la même dose [Van Dyk et al. \(1993\)](#).

Quelques années plus tard *Low et al.* propose un indicateur combiné pour la comparaison [Low et al. \(1998\)](#), [Low \(2010\)](#). Cette grandeur d'évaluation appelée γ_{index} , met en évidence à la fois le critère de tolérance en termes de dose Δd_{max} et le critère de tolérance spatiale DTA_{max} , l'indicateur est noté habituellement $\gamma_{\Delta d_{max}\%/DTA_{max}}$. Il est recommandé de prendre une valeur DTA_{max} trois fois plus grande que la résolution de la distribution de dose évaluée et également il faut que la différence normalisée de dose Δd_{max} soit supérieure à l'incertitude statistique de la mesure ou du calcul.

La distribution de l'indice γ_{index} est définie par la distance minimale entre un point de référence et la distribution évaluée. Chaque point de la distribution de référence sera l'origine d'une ellipse de rayon $r_1 = \Delta d_{max}$ et de rayon $r_2 = DTA_{max}$, la distribution évaluée passe avec succès le test du γ_{index} lorsque au moins l'un de ses points se trouve à l'intérieur de l'ellipse dans l'espace normalisé dose-distance. En pratique la distance Γ définie par l'équation [A.1](#) est calculée pour l'ensemble des points évalués au voisinage du point de référence.

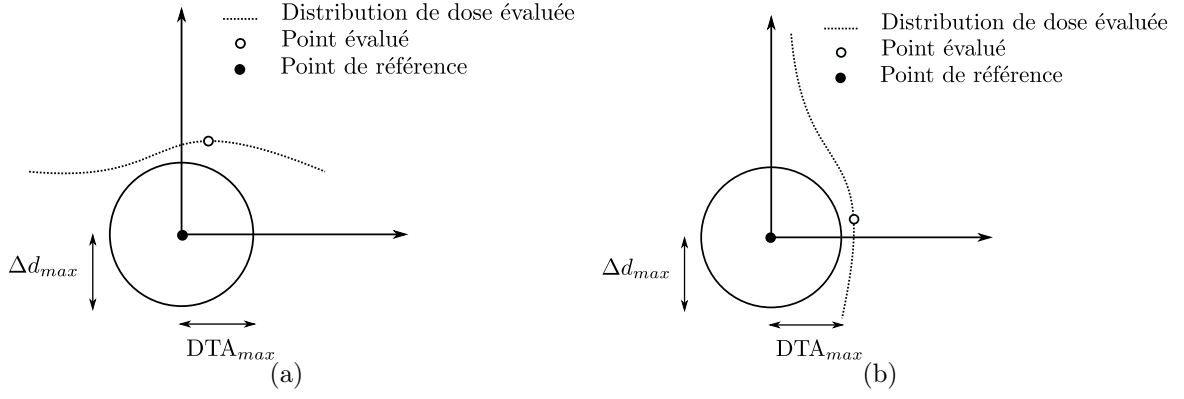


FIGURE A.1: Adaptation automatique du γ_{index} en fonction de la région analysée. (a) : région à l'intérieur du champ d'irradiation, la différence spatiale est négligeable devant la différence de dose; (b) : région de la pénombre, la différence de dose est négligeable devant l'écart spatial.

$$\Gamma(\vec{r}_e, \vec{r}_r) = \sqrt{\left(\frac{D_e(\vec{r}_e) - D_r(\vec{r}_r)}{\Delta d_{max}}\right)^2 + \left(\frac{\vec{r}_e - \vec{r}_r}{DTA_{max}}\right)^2}, \quad (\text{A.1})$$

$\vec{r}_e$ et $D_e(\vec{r}_e)$; $\vec{r}_r$ et $D_r(\vec{r}_r)$ sont respectivement la position et la dose correspondante au point de référence et au point évalué. Le γ_{index} au point de référence $\vec{r}_r$ est donc déterminé par la valeur minimale de l'ensemble $\Gamma(\vec{r}_e, \vec{r}_r)$:

$$\gamma(\vec{r}_r) = \min(\Gamma(\vec{r}_e, \vec{r}_r)) \quad \forall \vec{r}_e. \quad (\text{A.2})$$

A.2 Interprétation

Le γ_{index} est une distance entre deux distributions dans l'espace dose-distance. Cette distance est exprimée en fonction d'une composante spatiale et une composante de dose. Un point passe avec succès le test lorsque la valeur du γ_{index} est inférieure à l'unité, toute valeur supérieure n'indiquera pas uniquement que le point en question a échoué mais en plus permettra d'estimer l'erreur. Supposons que la valeur obtenue est $\gamma = 1.1$, pour une analyse 3%/3 mm, cela signifie que l'erreur pour ce point est de l'ordre de 10%, que nous pouvons expliquer dans le cas le plus simple par un écart spatial de 3.3 mm ou une différence de dose de 3.3% [Low \(2010\)](#).

L'une des propriétés importante de cet outil de comparaisons est son adaptation automatique en fonction de la région analysée. En observant l'expression de l'équation A.1, nous pouvons apercevoir que le premier terme mesurant la différence de dose, sera prépondérant par rapport au deuxième terme lorsque le point d'évaluation est très proche de l'axe y de l'ellipse d'acceptabilité. Inversement, lorsque le point d'évaluation est très proche de l'axe x de l'ellipse, le deuxième terme traduisant l'écart spatial sera prépondérant [fig.A.1](#). Cette flexibilité du test tiendra en compte de manière efficace la nature de la zone analysée (zone à fort ou à faible gradient de dose).

Il est important de souligner que le test du γ_{index} est fortement influencé par la résolution spatiale de la distribution de dose évaluée [Depuydt et al. \(2002\)](#). La valeur

du γ_{index} peut changer en fonction de l'intervalle entre deux mesures successives ou bien en fonction de la taille des voxels lorsqu'il s'agit d'une simulation fig.A.2.

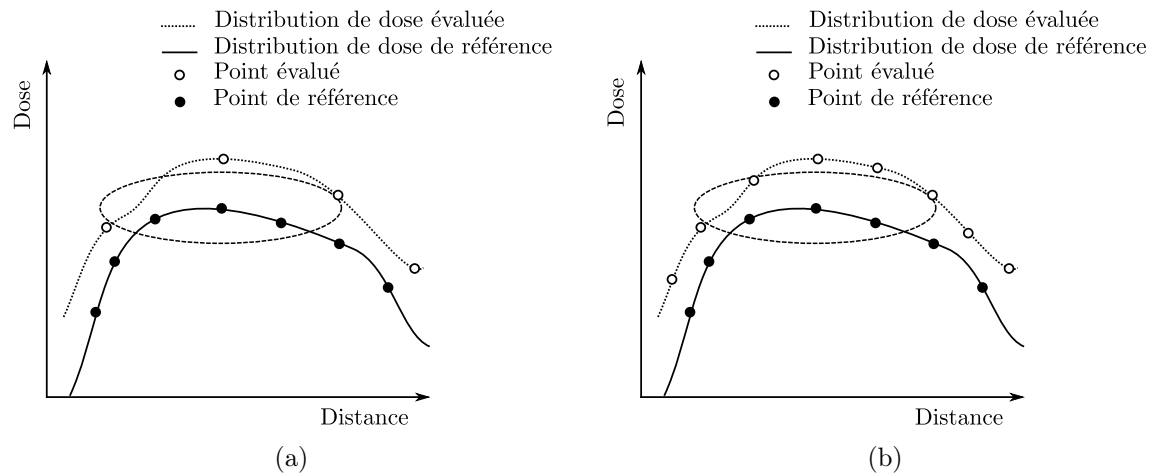


FIGURE A.2: Effet de la résolution sur le résultat de l'analyse γ_{index} de la distribution de dose au point de référence en question. (a) : tous les points se trouvent à l'extérieur de l'ellipse d'acceptabilité, donc la distribution évaluée n'a pas réussi le test γ_{index} pour ce point de référence ; (b) : l'augmentation du nombre de points évalués a changé le résultat du test, nous observons que l'un des points est à l'intérieur de la surface d'acceptabilité.

Annexe B

Outils d'analyse statistique

B.1 Test χ^2

B.1.1 Introduction

Le test de χ^2 permet d'estimer le degré de ressemblance entre les densités de probabilité de deux variables aléatoires. Ce test consiste à évaluer la validité d'une hypothèse H_0 , souvent appelée hypothèse nulle qui suppose que les deux variables aléatoires dérivent de la même loi statistique. En pratique ce test est souvent utilisé pour vérifier qu'une suite d'échantillons aléatoires $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ provient d'une loi statistique $\mathcal{F}$ connue. Un nombre α généralement 0.05 ou 0.01 fixé par l'expérimentateur, représente la probabilité d'accepter l'hypothèse H_0 alors qu'elle est fausse.

B.1.2 Loi de χ^2

Soient $X_1, X_2, \dots, X_n$ des variables aléatoires suivant la loi normale de moyenne nulle et d'écart type unitaire $\mathcal{N}(0, 1)$. La loi du χ^2 à n degrés de liberté est exprimée par la somme suivante :

$$\chi_n^2 = \sum_{i=1}^n X_i^2. \quad (\text{B.1})$$

La loi de χ^2 a une densité de probabilité de la forme :

$$f_n(x) = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})} x^{\frac{n}{2}-1} \exp\left(-\frac{x}{2}\right), \quad x \in [0, +\infty[. \quad (\text{B.2})$$

où Γ est la fonction gamma [Thom \(1958\)](#).

B.1.3 Procédure du test

Le terme χ^2 d'ajustement à n échantillons entre une loi $p = (p_1, p_2, p_3, \dots, p_k)$ et une loi empirique $\bar{p}_n = (N_1, N_2, \dots, N_k)$ est décrit par la variable aléatoire :

$$\chi_n^2(p, \bar{p}_n) = \sum_{i=1}^k \frac{(np_i - N_i)^2}{np_i}, \quad (\text{B.3})$$

La première étape du test est le calcul de la somme $\chi_n^2(p, \bar{p}_n)$ de l'équation B.3, pour un échantillon de n valeurs aléatoires. Lorsque le $\chi_n^2(p, \bar{p}_n)$ est trop grand, l'hypothèse H_0 est peu crédible. La valeur α permettra de connaître le seuil au-delà duquel H_0 est rejetée. En résumé la procédure se passe de la manière suivante [Gallardo \(2007\)](#) :

1. La probabilité α est choisi, elle est appelée également risque d'erreur.
2. En utilisant les distributions tabulées du χ_{k-1}^2 , il faut déterminer la borne $b_\alpha = \chi_{k-1, \alpha}^2$ queue d'ordre α de la loi de la variable X du χ_{k-1}^2 :

$$P(X > b_\alpha) = \alpha \quad (\text{B.4})$$

3. L'hypothèse H_0 est rejetée si :

$$\chi_n^2 > b_\alpha. \quad (\text{B.5})$$

B.2 Incertitude statistique

Le calcul de la distribution de dose par la méthode de Monte Carlo est basé sur l'estimation de l'énergie moyenne déposée dans un volume élémentaire (voxel), par N particules simulées (histoires). Nous pouvons écrire la dose moyenne sous la forme :

$$\langle d \rangle_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_{k,i} \quad (\text{B.6})$$

$d_{k,i}$ est la dose déposée par l'événement i dans le voxel k [Chetty et al. \(2006\)](#).

Le calcul de l'incertitude statistique provenant de l'aspect aléatoire de la méthode de Monte Carlo utilisée pour l'estimation de la dose moyenne, est effectué suivant deux démarches implémentées dans le code de simulation **BEAMnrc**. Ces deux méthodes sont appelées respectivement *batch method* et *history by history method*.

B.2.1 Batch method

Le calcul de l'incertitude sur une grandeur x par cette méthode consiste à subdiviser la simulation globale en n simulations indépendantes. La valeur estimée de

l'incertitude moyenne $s_{\bar{x}}$ sur la grandeur x est écrite sous la forme :

$$s_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n(n-1)}} \quad (\text{B.7})$$

x_i est l'estimation de la grandeur x pour la i^{eme} simulation.

$\bar{x}$ est la valeur moyenne de la grandeur x .

Cette méthode montre trois limitations majeures :

1. Le nombre de simulation n est souvent petit, ce qui va induire des fluctuations statistiques provenant du calcul d'incertitude lui-même.
2. Cette approche néglige toute corrélation éventuelle entre les événements primaires simulés, ce qui n'est pas juste dans le cas d'utilisation des espaces des phases recyclés plusieurs fois au cours d'une même simulation.
3. La dernière limitation concerne la lenteur du calcul du terme eq.B.7 lorsqu'il s'agit d'une géométrie comportant un nombre $a \times b \times c$ voxels.

B.2.2 *History by history method*

Une amélioration de la méthode d'estimation de l'incertitude statistique a été proposée principalement pour éliminer la décomposition du calcul en plusieurs simulations élémentaires. Cette nouvelle approche a été appelée *history by history method* [Briesmeister \(1986\)](#), [Walters et al. \(2002\)](#). La valeur estimée de l'incertitude $s_{\bar{x}}$ est donnée par l'expression suivante :

$$s_{\bar{x}} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \left[\frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} - \left(\frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \right)^2 \right]} \quad (\text{B.8})$$

n dans l'équation B.8 représente cette fois le nombre d'événements primaires statistiquement indépendants.

Cette méthode permet de calculer l'estimation de l'incertitude directement après la fin de la simulation, ce qui permet d'éviter de stocker des informations occupant un espace énorme, étape indispensable pour la méthode précédente.

Annexe C

Publications et communication

C.1 Publications en revues indexées

- Aboulbanine, Z. & El Khayati, N. (2018), ‘Validation of a virtual source model of medical linac for monte carlo dose calculation using multi-threaded Geant4’, *Physics in Medicine & Biology* **63**(8), 085008.
- Aboulbanine, Z. & El Khayati, N. (2019), ‘A theoretical multileaf collimator model for fast monte carlo dose calculation of linac 6/10 MV photon beams’, *Biomedical Physics & Engineering Express* **5**(5), 055004.

C.2 Communication par Poster

- Aboulbanine, Z. et El Khayati, N. (2018), ‘Élaboration d’un modèle de sources virtuelles d’un accélérateur linéaire médical’ [Poster], *École Franco-Marocaine de la Mesure et de l’Instrumentation Nucléaire*, Rabat, Maroc.

Bibliographie

- Aboulbanine, Z. & El Khayati, N. (2018), ‘Validation of a virtual source model of medical linac for monte carlo dose calculation using multi-threaded geant4’, Physics in Medicine & Biology **63**(8), 085008.
- Aboulbanine, Z. & El Khayati, N. (2019), ‘A theoretical multileaf collimator model for fast monte carlo dose calculation of linac 6/10 MV photon beams’, Biomedical Physics & Engineering Express **5**(5), 055004.
- Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K. a., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G. . et al. (2003), ‘Geant4—a simulation toolkit’, Nuclear instruments and methods in physics research section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **506**(3), 250–303.
- Ahnesjö, A. (1984), Application of transform algorithms for calculation of absorbed dose in photon beams, in ‘8th International Conference on Computers in Radiotherapy’, pp. 17–20.
- Ahnesjö, A. & Aspradakis, M. M. (1999), ‘Dose calculations for external photon beams in radiotherapy’, Physics in Medicine & Biology **44**(11), R99.
- Akkary, H. & Driscoll, M. A. (1998), A dynamic multithreading processor, in ‘Proceedings of the 31st annual ACM/IEEE international symposium on Microarchitecture’, IEEE Computer Society Press, pp. 226–236.
- Alexandrescu, A. (2001), Modern C++ design : generic programming and design patterns applied, Addison-Wesley.
- Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Arce, P., Asai, M., Aso, T., Bagli, E., Bagulya, A., Banerjee, S., Barrand, G. et al. (2016), ‘Recent developments in geant4’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **835**, 186–225.
- Amako, K., Guatelli, S., Ivanchenko, V. N., Maire, M., Mascialino, B., Murakami, K., Nieminen, P., Pandola, L., Parlati, S., Pia, M. G. et al. (2005), ‘Comparison of geant4 electromagnetic physics models against the nist reference data’.
- Andreo, P. (1991), ‘Monte carlo techniques in medical radiation physics’, Physics in Medicine & Biology **36**(7), 861.
- Andreo, P. & Brahme, A. (1984), ‘Restricted energy-loss straggling and multiple scattering of electrons in mixed monte carlo procedures’, Radiation research **100**(1), 16–29.
- Andreo, P., Burns, D. T., Hohlfeld, K., Huq, M. S., Kanai, T., Laitano, F., Smyth, V. & Vynckier, S. (2000), ‘Absorbed dose determination in external beam radiotherapy : an international code of practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water’, Iaea Trs **398**.
- Andreo, P., Huq, M. S., Westermarck, M., Song, H., Tilikidis, A., DeWerd, L. & Shortt, K. (2002), ‘Protocols for the dosimetry of high-energy photon and electron beams : a comparison of the iaea trs-398 and previous international codes of practice’, Physics in Medicine & Biology **47**(17), 3033.

- Anthony, P., Arnold, R., Arroyo, C., Bega, K., Biesiada, J., Bosted, P., Bower, G., Cahoon, J., Carr, R., Cates, G. et al. (2005), ‘Precision measurement of the weak mixing angle in moeller scattering’, Physical review letters **95**(8), 081601.
- Arce, P., Apostolakis, J. & Cosmo, G. (2008), A technique for optimised navigation in regular geometries, in ‘2008 IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record’, IEEE, pp. 857–859.
- Arce, P. & Lagares, J. I. (2018), ‘Cpu time optimization and precise adjustment of the geant4 physics parameters for a varian 2100 c/d gamma radiotherapy linear accelerator simulation using gamos’, Physics in Medicine & Biology **63**(3), 035007.
- Attix, F. H. (2008), Introduction to radiological physics and radiation dosimetry, John Wiley & Sons.
- Badel, J.-N. (2009), ‘Contrôle dosimétrique des traitements de radiothérapie par simulation monte carlo de l’image de dose portale transmise’, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon., Algerie .
- Baró, J., Roteta, M., Fernández-Varea, J. & Salvat, F. (1994), ‘Analytical cross sections for monte carlo simulation of photon transport’, Radiation physics and chemistry **44**(5), 531–552.
- Baro, J., Sempau, J., Fernández-Varea, J. & Salvat, F. (1995), ‘Penelope : an algorithm for monte carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **100**(1), 31–46.
- Berger, M. (1999), ‘Stopping-power and range tables for electrons, protons, and helium ions : Physical reference data’.
- Berger, M. J. (1963), Monte carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles, Technical report.
- Berger, M. J. (1992), ‘Estar, pstar, and astar : Computer programs for calculating stopping-power and range tables for electrons, protons, and helium ions’.
- Berger, M. J. & Hubbell, J. (1987), Xcom : Photon cross sections on a personal computer, Technical report, National Bureau of Standards.
- Berger, M. J., Inokuti, M., Andersen, H. H., Bichsel, H., Powers, D., Seltzer, S. M., Thwaites, D. & Watt, D. E. (1993), Stopping powers for protons and alpha particles, Technical report.
- Bethe, H. A. (1953), ‘Moliere’s theory of multiple scattering’, Physical review **89**(6), 1256.
- Bethesda, M. (1992), ‘Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues’, ICRU report **46**.
- Bhabha, H. (1935), ‘The creation of electron pairs by fast charged particles’, Proc. R. Soc. Lond. A **152**(877), 559–586.
- Bhabha, H. (1936), ‘The scattering of positrons by electrons with exchange on dirac’s theory of the positron’, Proc. R. Soc. Lond. A **154**(881), 195–206.
- Bielajew, A. F. (1994), ‘Plural and multiple small-angle scattering from a screened rutherford cross section’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **86**(3-4), 257–269.
- Bielajew, A. F., Mohan, R. & Chui, C.-S. (1989), ‘Improved bremsstrahlung photon angular sampling in the egs4 code system’, National Research Council of Canada Report PIRS-0203 .
- Bielajew, A. F. & Rogers, D. (1986), ‘Presta : The parameter reduced electron-step transport algorithm for electron monte carlo transport’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **18**(1-6), 165–181.

- Biggs, F. & Lighthill, R. (1988), Analytical approximations for x-ray cross sections iii, Technical report, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (USA).
- Bitjukov, S., Maksimushkina, A. & Smirnova, V. (2016), ‘Comparison of histograms in physical research’, Nuclear Energy and Technology **2**(2), 108–113.
- Bonderup, E. & Hvelplund, P. (1971), ‘Stopping power and energy straggling for swift protons’, Physical Review A **4**(2), 562.
- Bortfeld, T. (2006), ‘Imrt : a review and preview’, Physics in Medicine & Biology **51**(13), R363.
- Botto, D. J. & Gavril, M. (1982), ‘Radiative corrections to atomic photoeffect and tip bremsstrahlung. iii’, Physical Review A **26**(1), 237.
- Boyer, A. & Mok, E. (1985), ‘A photon dose distribution model employing convolution calculations’, Medical physics **12**(2), 169–177.
- Bragg, W. & Kleeman, R. (1905), ‘On the α particles of radium, and their loss of range in passing through various atoms and molecules’, Philos. Mag. & J. Sci pp. 318–340.
- Briesmeister, J. (1986), ‘Mcnp : A general purpose monte carlo code for neutron and photon transport version 3a’, Los Alamos National Laboratory manual LA-7396-M Rev 2 .
- Brun, R. & Rademakers, F. (1997), ‘Root—an object oriented data analysis framework’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **389**(1-2), 81–86.
- Butcher, J. C. & Messel, H. (1960), ‘Electron number distribution in electron-photon showers in air and aluminium absorbers’, Nuclear Physics **20**, 15–128.
- Caffisch, R. E. (1998), ‘Monte carlo and quasi-monte carlo methods’, Acta numerica **7**, 1–49.
- Calandrino, R., Cattaneo, G. M., Fiorino, C., Longobardi, B., Mangili, P. & Signorotto, P. (1997), ‘Detection of systematic errors in external radiotherapy before treatment delivery’, Radiotherapy and Oncology **45**(3), 271–274.
- Capote, R., J. R. M. C. R. D. S.-D. F. S. J. S. J. . S. J. (2006), Phase-space database for external beam radiotherapy summary report of a consultants’ meeting, Technical Report INDC(NDS)–0484, International Atomic Energy Agency (IAEA).
- Capote, R., Jeraj, R., Ma, C., Rogers, D., Sánchez-Doblado, F., Sempau, J., Seuntjens, J. & Siebers, J. (2006), Phase-space database for external beam radiotherapy. summary report of a consultants’ meeting, Technical report, International Atomic Energy Agency.
- Cassell, K., Hobday, P. A. & Parker, R. (1981), ‘The implementation of a generalised batho inhomogeneity correction for radiotherapy planning with direct use of ct numbers’, Physics in Medicine & Biology **26**(5), 825.
- Chaney, E., Cullip, T. & Gabriel, T. (1994), ‘A monte carlo study of accelerator head scatter’, Medical physics **21**(9), 1383–1390.
- Chazottes, J.-R., Méléard, S. & Graham, C. (2019), Une introduction aux probabilités - Partie 2, Coursera Inc, École polytechnique, France.
- Chetty, I., Curran, B., Cygler, J., DeMarco, J., Ezzel, G., Faddegon, B. et al. (2007), ‘Issues associated with clinical implementation of monte carlo-based photon and electron external beam treatment planning. report of the aapm task group no. 105’, Med. Phys **34**(12), 4818–4853.
- Chetty, I. J., Rosu, M., Kessler, M. L., Fraass, B. A., Ten Haken, R. K., McShan, D. L. et al. (2006), ‘Reporting and analyzing statistical uncertainties in monte carlo-based treatment planning’, International Journal of Radiation Oncology* Biology* Physics **65**(4), 1249–1259.

- Cho, W., Kielar, K. N., Mok, E., Xing, L., Park, J.-H., Jung, W.-G. & Suh, T.-S. (2011), ‘Multi-source modeling of flattening filter free (fff) beam and the optimization of model parameters’, Medical physics **38**(4), 1931–1942.
- Chu, W. (1976), ‘Calculation of energy straggling for protons and helium ions’, Physical Review A **13**(6), 2057.
- Chui, C., Mohan, R. & Lidofsky, L. (1984), Differential pencil beam dose computation model, in ‘Medical Physics’, Vol. 11, pp. 392–392.
- Clarkson, J. (1941), ‘A note on depth doses in fields of irregular shape’, The British Journal of Radiology **14**(164), 265–268.
- Convery, D. & Rosenbloom, M. (1992), ‘The generation of intensity-modulated fields for conformal radiotherapy by dynamic collimation’, Physics in medicine & biology **37**(6), 1359.
- Cooperman, G., Anchordoqui, L., Grinberg, V., McCauley, T., Reucroft, S. & Swain, J. (2000), ‘Scalable parallel implementation of geant4 using commodity hardware and task oriented parallel c’, arXiv preprint hep-ph/0001144 .
- Cortés-Giraldo, M. A., Quesada, J. M., Gallardo, M. I. & Capote, R. (2012), ‘An implementation to read and write iaea phase-space files in geant4-based simulations’, International journal of radiation biology **88**(1-2), 200–208.
- Cosmo, G., Collaboration, G. et al. (2014), Geant4–towards major release 10, in ‘Journal of Physics : Conference Series’, Vol. 513, IOP Publishing, p. 022005.
- Cullen, D. E. (1995), ‘A simple model of photon transport’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **101**(4), 499–510.
- Cullen, D. E., Hubbell, J. H., Kissel, L. et al. (1997), ‘Epd197 : the evaluated photon data library,’97 version’, UCRL-50400 **6**(5), 1–28.
- De Vlamynck, K., Palmans, H., Verhaegen, F., De Wagter, C., De Neve, W. & Thierens, H. (1999), ‘Dose measurements compared with monte carlo simulations of narrow 6 mv multileaf collimator shaped photon beams’, Medical physics **26**(9), 1874–1882.
- Demir, N., Kuluöztürk, Z. N. & Akkurt, İ. (2019), ‘Fluka monte carlo calculations for angular distribution of bremsstrahlung photons from thin targets’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **443**, 19–24.
- Deng, J., Jiang, S. B., Kapur, A., Li, J., Pawlicki, T. & Ma, C. (2000), ‘Photon beam characterization and modelling for monte carlo treatment planning’, Physics in Medicine & Biology **45**(2), 411.
- Depuydt, T., Van Esch, A. & Huyskens, D. P. (2002), ‘A quantitative evaluation of imrt dose distributions : refinement and clinical assessment of the gamma evaluation’, Radiotherapy and oncology **62**(3), 309–319.
- Desobry, G. & Boyer, A. (1991), ‘Bremsstrahlung review : an analysis of the schiff spectrum’, Medical physics **18**(3), 497–505.
- Dirkx, M. & Heijmen, B. (2000), ‘Testing of the stability of intensity modulated beams generated with dynamic multileaf collimation, applied to the mm50 racetrack microtron’, Medical physics **27**(12), 2701–2707.
- Dong, X., Cooperman, G., Apostolakis, J., Jarp, S., Nowak, A., Asai, M. & Brandt, D. (2012), Creating and improving multi-threaded geant4, in ‘Journal of Physics : Conference Series’, Vol. 396, IOP Publishing, p. 052029.

- Dotti, A., Elvira, V. D., Folger, G., Genser, K., Jun, S. Y., Kowalkowski, J. B. & Paterno, M. (2015), Geant4 computing performance benchmarking and monitoring, in 'Journal of Physics : Conference Series', Vol. 664, IOP Publishing, p. 062021.
- Earl, M. A., Shepard, D. M. & Yu, X. (2007), 'Method for the planning and delivery of radiation therapy'. US Patent 7,162,008.
- Eckhardt, R. (1987), 'Stan ulam, john von neumann, and the monte carlo method', Los Alamos Science **15**(131-136), 30.
- Ellett, W. H. & Brownell, G. L. (1960), 'A total absorption gamma ray spectrometer combining sodium iodide and plastic scintillators', Nuclear Instruments and Methods **7**(1), 56–62.
- Eyges, L. (1948), 'Multiple scattering with energy loss', Physical Review **74**(10), 1534.
- Faddegon, B. A., Ross, C. & Rogers, D. (1991), 'Angular distribution of bremsstrahlung from 15-mev electrons incident on thick targets of be, al, and pb', Medical physics **18**(4), 727–739.
- Feller, W. (1971), 'Law of large numbers for identically distributed variables', An introduction to probability theory and its applications **2**, 231–234.
- Fippel, M. (1999), 'Fast monte carlo dose calculation for photon beams based on the vmc electron algorithm', Medical physics **26**(8), 1466–1475.
- Fippel, M., Haryanto, F., Dohm, O., Nüsslin, F. & Kriesen, S. (2003), 'A virtual photon energy fluence model for monte carlo dose calculation', Medical Physics **30**(3), 301–311.
- Fippel, M., Laub, W., Huber, B. & Nuesslin, F. (1999), 'Xvmc-fast monte-carlo dose calculation for photon beam treatment planning', Zeitschrift fuer Medizinische Physik **9**(4), 255–260.
- Fippel, M. & Soukup, M. (2004), 'A monte carlo dose calculation algorithm for proton therapy', Medical physics **31**(8), 2263–2273.
- Fix, M. K., Stampanoni, M., Manser, P., Born, E. J., Mini, R. & Rügsegger, P. (2001), 'A multiple source model for 6 mv photon beam dose calculations using monte carlo', Physics in Medicine & Biology **46**(5), 1407.
- Ford, R. L. & Nelson, W. R. (1978), The egs code system : Computer programs for the monte carlo simulation of electromagnetic cascade showers (version 3), Technical report.
- Fraass, B., Doppke, K., Hunt, M., Kutcher, G., Starkschall, G., Stern, R. & Van Dyke, J. (1998), 'American association of physicists in medicine radiation therapy committee task group 53 : quality assurance for clinical radiotherapy treatment planning', Medical physics **25**(10), 1773–1829.
- Gallardo, L. (2007), Cours de statistique ; chapitre 2 : Tests d'ajustement d'un échantillon à une loi théorique, Université de Tours, Laboratoire de Mathématiques et Physique Théorique-UMR 6083 du CNRS, Parc de Grandmont, 37200 TOURS.
- Geant4 Collaboration, G. (2014), 'Geant4 user's guide for application developers', Accessible from the GEANT4 web page Version 10.01 **10**(01).
- Geant4 Collaboration, G. et al. (2016), 'Physics reference manual', Version : geant4 **10**(9).
- Gnedenko, B. V. (2017), Theory of probability, Routledge.
- Golder, E. & Settle, J. (1976), 'The box-müller method for generating pseudo-random normal deviates', Journal of the Royal Statistical Society : Series C (Applied Statistics) **25**(1), 12–20.
- González, W., García-Ferreira, I., Anguiano, M. & Lallena, A. (2015), 'A general photon source model for clinical linac heads in photon mode', Radiation Physics and Chemistry **117**, 140–152.

- Gottschalk, B. (2010), ‘On the scattering power of radiotherapy protons’, Medical physics **37**(1), 352–367.
- Goudsmit, S. & Saunderson, J. (1940), ‘Multiple scattering of electrons’, Physical Review **57**(1), 24.
- Grevillot, L., Bertrand, D., Dessy, F., Freud, N. & Sarrut, D. (2011), ‘A monte carlo pencil beam scanning model for proton treatment plan simulation using gate/geant4’, Physics in Medicine & Biology **56**(16), 5203.
- Grevillot, L., Frisson, T., Maneval, D., Zahra, N., Badel, J. & Sarrut, D. (2011), ‘Simulation of a 6 mv elekta precise linac photon beam using gate/geant4’, Physics in Medicine & Biology **56**(4), 903.
- Grevillot, L., Frisson, T., Zahra, N., Bertrand, D., Stichelbaut, F., Freud, N. & Sarrut, D. (2010), ‘Optimization of geant4 settings for proton pencil beam scanning simulations using gate’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam interactions with materials and atoms **268**(20), 3295–3305.
- Hall, N. C. (2011), ‘Recent improvements in geant4 electromagnetic physics models and interfaces’.
- Han, M. C., Yeom, Y. S., Lee, H. S., Shin, B., Kim, C. H. & Furuta, T. (2018), ‘Multi-threading performance of geant4, mcnp6, and phits monte carlo codes for tetrahedral-mesh geometry’, Physics in Medicine & Biology **63**(9), 09NT02.
- Hanson, A., Lanzl, L., Lyman, E. & Scott, M. (1951), ‘Measurement of multiple scattering of 15.7-mev electrons’, Physical Review **84**(4), 634.
- Hariri, S. & Shahriari, M. (2010), ‘Suggesting a new design for multileaf collimator leaves based on monte carlo simulation of two commercial systems’, Journal of applied clinical medical physics **11**(3), 173–185.
- Hayoun, M. (2002), ‘La méthode de monte carlo metropolis’, École «Simulation Numérique en Matière Condensée»(Paris, 29-31 mai 2002) .
- Heitler, W. (1954), ‘À the quantum theory of radiation. clarendon’.
- Hounsfield, G. N. (1973), ‘Computerized transverse axial scanning (tomography) : Part 1. description of system’, The British journal of radiology **46**(552), 1016–1022.
- Hounsfield, G. N. (1980), ‘Computed medical imaging’, Medical physics **7**(4), 283–290.
- Hubbell, J., Gimm, H. A. & O/verbo/, I. (1980), ‘Pair, triplet, and total atomic cross sections (and mass attenuation coefficients) for 1 mev-100 gev photons in elements z= 1 to 100’, Journal of physical and chemical reference data **9**(4), 1023–1148.
- Humm, J. L., Larsson, A. & Lief, E. P. (1996), ‘Dosimetric properties of a scanned beam microtron at low monitor unit settings : Importance for conformal therapy’, Medical physics **23**(3), 329–335.
- ICRU (1984), ‘Stopping powers for electrons and positrons’, Report No. 37, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD .
- ICRU, S. P. (1993), ‘Ranges for protons and alpha particles’.
- Ivanchenko, V., Kadri, O., Maire, M. & Urban, L. (2010), Geant4 models for simulation of multiple scattering, in ‘Journal of Physics : Conference Series’, Vol. 219, IOP Publishing, p. 032045.
- Jaffray, D., Battista, J., Fenster, A. & Munro, P. (1993), ‘X-ray sources of medical linear accelerators : Focal and extra-focal radiation’, Medical physics **20**(5), 1417–1427.
- Ji, X. (1997), ‘Deeply virtual compton scattering’, Physical Review D **55**(11), 7114.

- Jiang, S. B., Kapur, A. & Ma, C.-M. (2000), ‘Electron beam modeling and commissioning for monte carlo treatment planning’, Medical physics **27**(1), 180–191.
- Johns, H. & Cunningham, J. (1983), The physics of radiology, American lecture series, Charles C. Thomas.
- Jones, D. (1994), ‘Icru report 50—prescribing, recording and reporting photon beam therapy’, Medical physics **21**(6), 833–834.
- Kadri, O., Ivanchenko, V., Gharbi, F. & Trabelsi, A. (2009), ‘Incorporation of the goudsmit–saunderson electron transport theory in the geant4 monte carlo code’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **267**(23–24), 3624–3632.
- Kądziółka, E., Kisielewska-Birycka, M., Surowiak, T., Barszczewski, J. & Kukołowicz, P. F. (2006), ‘Information about the first elekta precise® accelerator installed in poland’, Reports of Practical Oncology & Radiotherapy **11**(3), 147–155.
- Kawrakow, I. (2000a), ‘Accurate condensed history monte carlo simulation of electron transport. i. egsrc, the new egs4 version’, Medical physics **27**(3), 485–498.
- Kawrakow, I. (2000b), ‘Accurate condensed history monte carlo simulation of electron transport. ii. application to ion chamber response simulations’, Medical physics **27**(3), 499–513.
- Kawrakow, I. & Bielajew, A. F. (1998), ‘On the condensed history technique for electron transport’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms **142**(3), 253–280.
- Kawrakow, I., Fippel, M. & Friedrich, K. (1996), ‘3d electron dose calculation using a voxel based monte carlo algorithm (vmc)’, Medical physics **23**(4), 445–457.
- Kawrakow, I., Rogers, D. & Walters, B. (2004), ‘Large efficiency improvements in beamnrc using directional bremsstrahlung splitting : Directional bremsstrahlung splitting’, Medical physics **31**(10), 2883–2898.
- Kawrakow, I. & Walters, B. (2006), ‘Efficient photon beam dose calculations using dosxyznrc with beamnrc’, Medical physics **33**(8), 3046–3056.
- Kennedy Jr, W. J. & James, E. (1980), ‘Gentle. statistical computing, volume 33 of statistics : A series of textbooks and monographs’.
- Koch, H. & Motz, J. (1959), ‘Bremsstrahlung cross-section formulas and related data’, Reviews of modern physics **31**(4), 920.
- Lassila-Perini, K. & Urbán, L. (1995), ‘Energy loss in thin layers in geant’, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **362**(2–3), 416–422.
- Lee, D.-U., Villasenor, J. D., Luk, W. & Leong, P. H. W. (2006), ‘A hardware gaussian noise generator using the box-muller method and its error analysis’, IEEE Transactions on Computers **55**(6), 659–671.
- Lee, P. C. (1997), ‘Monte carlo simulations of the differential beam hardening effect of a flattening filter on a therapeutic x-ray beam’, Medical physics **24**(9), 1485–1489.
- Lehmer, D. H. (1951), ‘Mathematical methods in large-scale computing units’, Annu. Comput. Lab. Harvard Univ. **26**, 141–146.
- Lewis, H. (1950), ‘Multiple scattering in an infinite medium’, Physical review **78**(5), 526.
- Lewis, R., Ryde, S., Hancock, D. & Evans, C. (1999), ‘An mcnp-based model of a linear accelerator x-ray beam’, Physics in Medicine & Biology **44**(5), 1219.

- Liu, H. H., Mackie, T. R. & McCullough, E. C. (1997), 'A dual source photon beam model used in convolution/superposition dose calculations for clinical megavoltage x-ray beams', Medical physics **24**(12), 1960–1974.
- Lovelock, D., Chui, C. & Mohan, R. (1995), 'A monte carlo model of photon beams used in radiation therapy', Medical physics **22**(9), 1387–1394.
- Low, D. A. (2010), Gamma dose distribution evaluation tool, in 'Journal of Physics-Conference Series', Vol. 250, p. 012071.
- Low, D. A., Harms, W. B., Mutic, S. & Purdy, J. A. (1998), 'A technique for the quantitative evaluation of dose distributions', Medical physics **25**(5), 656–661.
- Ma, C.-M., Faddegon, B. A., Rogers, D. & Mackie, T. (1997), 'Accurate characterization of monte carlo calculated electron beams for radiotherapy', Medical physics **24**(3), 401–416.
- Ma, C., Pawlicki, T., Lee, M., Jiang, S., Li, J., Deng, J., Yi, B., Mok, E. & Boyer, A. (2000), 'Energy- and intensity-modulated electron beams for radiotherapy', Physics in Medicine & Biology **45**(8), 2293.
- Mackie, T., Bielajew, A., Rogers, D. & Battista, J. (1988), 'Generation of photon energy deposition kernels using the egs monte carlo code', Physics in Medicine & Biology **33**(1), 1.
- Mackie, T., Scrimger, J. & Battista, J. (1985), 'A convolution method of calculating dose for 15-mv x rays', Medical physics **12**(2), 188–196.
- Maneval, D. (2019), Conception d'un formalisme de pouvoir d'arrêt équivalent et accélération graphique : des simulations Monte Carlo plus efficaces en protonthérapie, PhD thesis, Université Laval, Québec, Canada.
- Marsaglia, G. & Zaman, A. (1991), 'A new class of random number generators', The Annals of Applied Probability pp. 462–480.
- Mayles, P., Nahum, A. E. & Rosenwald, J.-C. (2007), Handbook of radiotherapy physics : theory and practice, CRC Press.
- McCall, R. C., McIntyre, R. D. & Turnbull, W. G. (1978), 'Improvement of linear accelerator depth-dose curves', Medical physics **5**(6), 518–524.
- Metropolis, N. & Ulam, S. (1949), 'The monte carlo method', Journal of the American statistical association **44**(247), 335–341.
- Milan, J. & Bentley, R. (1974), 'The storage and manipulation of radiation dose data in a small digital computer', The British journal of radiology **47**(554), 115–121.
- Mohan, R., Chui, C. & Lidofsky, L. (1985), 'Energy and angular distributions of photons from medical linear accelerators', Medical physics **12**(5), 592–597.
- Mohan, R. & Chui, C.-S. (1987), 'Use of fast fourier transforms in calculating dose distributions for irregularly shaped fields for three-dimensional treatment planning', Medical physics **14**(1), 70–77.
- Møller, C. (1932), 'Zur theorie des durchgangs schneller elektronen durch materie', Annalen der Physik **406**(5), 531–585.
- Munro, P., Rawlinson, J. & Fenster, A. (1988), 'Therapy imaging : Source sizes of radiotherapy beams', Medical physics **15**(4), 517–524.
- Nahum, A. (2015), 'Monte carlo techniques in radiation therapy', Medical Physics **42**(8), 4999–5000.

- Nilsson, B. & Brahme, A. (1981), ‘Contamination of high-energy photon beams by scattered photons.’, Strahlentherapie **157**(3), 181–186.
- Nunan, C. S. (1989), ‘Multileaf collimator and compensator for radiotherapy machines’. US Patent 4,868,843.
- Otto, K. (2008), ‘Volumetric modulated arc therapy : Imrt in a single gantry arc’, Medical physics **35**(1), 310–317.
- Paelinck, L., Reynaert, N., Thierens, H., Neve, W. D. & Wagter, C. D. (2005), ‘Experimental verification of lung dose with radiochromic film : comparison with monte carlo simulations and commercially available treatment planning systems’, Physics in Medicine & Biology **50**(9), 2055.
- Perkins, S., Cullen, D., Chen, M., Rathkopf, J., Scofield, J. & Hubbell, J. (1991), Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the llnl evaluated atomic data library (eadl), z= 1–100, Technical report, Lawrence Livermore National Lab., CA (United States).
- Podgorsak, E. B. (2003), ‘Review of radiation oncology physics : a handbook for teachers and students’, Vienna, International Atomic Energy Agency. Educational reports series .
- Poole, C. M., Cornelius, I., Trapp, J. V. & Langton, C. M. (2012), ‘A cad interface for geant4’, Australasian physical & engineering sciences in medicine **35**(3), 329–334.
- Poon, E. S. (2004), Validation of the GEANT4 Monte Carlo code for radiotherapy applications, PhD thesis, McGill University.
- Poon, E. & Verhaegen, F. (2005), ‘Accuracy of the photon and electron physics in geant4 for radiotherapy applications’, Medical physics **32**(6Part1), 1696–1711.
- Raeseide, D. (1976), ‘Monte carlo principles and applications’, Physics in Medicine & Biology **21**(2), 181.
- Rho, J.-Y., Hobatho, M. & Ashman, R. (1995), ‘Relations of mechanical properties to density and ct numbers in human bone’, Medical engineering & physics **17**(5), 347–355.
- Rodriguez Castillo, M. L. (2016), Automation of the Monte Carlo simulation of medical linear accelerators, PhD thesis, Universitat Politècnica de Catalunya. Institut de Tècniques Energètiques.
- ROENTGEN, W. (1959), ‘On a new kind of ray (first report).’, Münchener medizinische Wochenschrift (1950) **101**, 1237–1239.
- Rogers, D. (2006), ‘Fifty years of monte carlo simulations for medical physics’, Physics in Medicine & Biology **51**(13), R287.
- Rogers, D., Faddegon, B., Ding, G., Ma, C.-M., We, J. & Mackie, T. (1995), ‘Beam : a monte carlo code to simulate radiotherapy treatment units’, Medical physics **22**(5), 503–524.
- Rucci, A., Carletti, C., Cravero, W. & Strbac, B. (2014), ‘Use of iaea’s phase-space files for the implementation of a clinical accelerator virtual source model’, Physica Medica **30**(2), 242–248.
- Rucci, A., Carletti, C., Cravero, W. & Strbac, B. (2016), ‘Use of iaea’s phase-space files for virtual source model implementation : Extension to large fields’, Physica Medica **32**(8), 1030–1033.
- Rumbaugh, J., Blaha, M., Premerlani, W., Eddy, F., Lorensen, W. E. et al. (1991), Object-oriented modeling and design, Vol. 199, Prentice-hall Englewood Cliffs, NJ.
- Sakamoto, Y. (1993), Photon cross section data photox for pegas4 code, Technical report.
- Salvat, F. (2014), The penelope code system. specific features and recent improvements, in ‘SNA+ MC 2013-Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications+ Monte Carlo’, EDP Sciences, p. 06017.

- Salvat, F., Fernández-Varea, J. M. & Sempau, J. (2006), Penelope-2006 : A code system for monte carlo simulation of electron and photon transport, in ‘Workshop proceedings’, Vol. 4, Nuclear Energy Agency, Organization for Economic Co-operation and
- Salvat, F., Fernández-Varea, J. M. & Sempau, J. (2008), Penelope-2008 : A code system for monte carlo simulation of electron and photon transport, in ‘the Workshop Proceedings, June’.
- Sarrut, D. & Guigues, L. (2008), ‘Region-oriented ct image representation for reducing computing time of monte carlo simulations’, Medical physics **35**(4), 1452–1463.
- Schlegel, W. & Mahr, A. (2007), 3D conformal radiation therapy : Multimedia introduction to methods and techniques, Springer Publishing Company, Incorporated.
- Schoknecht, G. (1971), ‘Scattering of photon pencil-beams in the energy band of 50 kev to 1, 25 mev’, Strahlentherapie **142**(5), 561–567.
- Scott, W. T. (1963), ‘The theory of small-angle multiple scattering of fast charged particles’, Reviews of modern physics **35**(2), 231.
- Seco, J. & Verhaegen, F. (2013), Monte Carlo techniques in radiation therapy, CRC press.
- Seltzer, S. M. & Berger, M. J. (1984), ‘Improved procedure for calculating the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons’, The International Journal of Applied Radiation and Isotopes **35**(7), 665–676.
- Sempau, J., Sanchez-Reyes, A., Salvat, F., ben Tahar, H. O., Jiang, S. & Fernández-Varea, J. (2001), ‘Monte carlo simulation of electron beams from an accelerator head using penelope’, Physics in Medicine & Biology **46**(4), 1163.
- Sempau, J., Wilderman, S. J. & Bielajew, A. F. (2000), ‘Dpm, a fast, accurate monte carlo code optimized for photon and electron radiotherapy treatment planning dose calculations’, Physics in Medicine & Biology **45**(8), 2263.
- Sham, E., Seuntjens, J., Devic, S. & Podgorsak, E. B. (2008), ‘Influence of focal spot on characteristics of very small diameter radiosurgical beams’, Medical physics **35**(7Part1), 3317–3330.
- Sheikh-Bagheri, D. & Rogers, D. (2002), ‘Monte carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the beam code’, Medical physics **29**(3), 391–402.
- Sheikh-Bagheri, D., Rogers, D., Ross, C. K. & Seuntjens, J. P. (2000), ‘Comparison of measured and monte carlo calculated dose distributions from the nrc linac’, Medical physics **27**(10), 2256–2266.
- Shepard, D., Earl, M., Li, X., Naqvi, S. & Yu, C. (2002), ‘Direct aperture optimization : a turnkey solution for step-and-shoot imrt’, Medical physics **29**(6), 1007–1018.
- Siddon, R. L. (1984), ‘Generalised batho correction factor (radiotherapy dosimetry)’, Physics in Medicine & Biology **29**(12), 1575.
- Sontag, M. R. & Cunningham, J. (1977), ‘Corrections to absorbed dose calculations for tissue inhomogeneities’, Medical physics **4**(5), 431–436.
- Spiers, F. (1941), ‘Inverse square law errors in gamma-ray dose measurements’, The British Journal of Radiology **14**(161), 147–156.
- Spirou, S. V. & Chui, C.-S. (1998), ‘A gradient inverse planning algorithm with dose-volume constraints’, Medical physics **25**(3), 321–333.
- Sternheimer, R., Berger, M. & Seltzer, S. M. (1984), ‘Density effect for the ionization loss of charged particles in various substances’, Atomic Data and Nuclear Data Tables **30**(2), 261–271.

- Sternheimer, R. M. (1952), 'The density effect for the ionization loss in various materials', Physical Review **88**(4), 851.
- Sternheimer, R. & Peierls, R. (1971), 'General expression for the density effect for the ionization loss of charged particles', Physical Review B **3**(11), 3681.
- Steyn, J., Huang, R. & Harris, D. (1973), 'Monte carlo calculation of clad nai (tl) scintillation crystal response to gamma photons', Nuclear Instruments and Methods **107**(3), 465–475.
- Terrissol, M. & Patau, J. (1978), 'Simulation du transport d'électrons rapides dans des cibles minces d'aluminium par une méthode de monte carlo', Journal de Physique **39**(2), 189–193.
- Terrissol, M., Patau, J. & Eudaldo, T. (1978), Application à la microdosimétrie et à la radiobiologie de la simulation du transport des électrons de basse énergie dans l'eau à l'état liquide, in 'Sixth Symposium on Microdosimetry', pp. 169–178.
- Thistleton, W. J., Marsh, J. A., Nelson, K. & Tsallis, C. (2007), 'Generalized box-müller method for generating q -gaussian random deviates', IEEE transactions on information theory **53**(12), 4805–4810.
- Thom, H. C. (1958), 'A note on the gamma distribution', Monthly Weather Review **86**(4), 117–122.
- Thwaites, D. (1990), 'Use of computers in external beam radiotherapy procedures with high-energy photons and electrons, in : Icru report 42, international commission on radiation units and measurements, london (1987), p. 70, isbn : 0-913394-36-x'.
- Tian, Z., Li, Y., Folkerts, M., Shi, F., Jiang, S. B. & Jia, X. (2015), 'An analytic linear accelerator source model for gpu-based monte carlo dose calculations', Physics in Medicine & Biology **60**(20), 7941.
- Toutaoui, A., Khelassi-Toutaoui, N., Hattali, B. et al. (2014), 'Monte carlo photon beam modeling and commissioning for radiotherapy dose calculation algorithm', Physica Medica **30**(7), 833–837.
- TRS, I. (2000), '398', Absorbed dose determination in external beam radiotherapy : an international code of practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water .
- Tsai, Y.-S. (1974), 'Pair production and bremsstrahlung of charged leptons', Reviews of Modern Physics **46**(4), 815.
- Tsien, K. (1955), 'The application of automatic computing machines to radiation treatment planning', The British journal of radiology **28**(332), 432–439.
- Tsien, K. (1958), 'A study of basic external radiation treatment techniques with the aid of automatic computing machines', The British journal of radiology **31**(361), 32–40.
- Udale, M. (1988), 'A monte carlo investigation of surface doses for broad electron beams', Physics in Medicine & Biology **33**(8), 939.
- Ulmer, W., Pyyry, J. & Kaissl, W. (2005), 'A 3d photon superposition/convolution algorithm and its foundation on results of monte carlo calculations', Physics in Medicine & Biology **50**(8), 1767.
- van de Geijn, J. (1972), 'Computational methods in beam therapy planning', Computer programs in biomedicine **2**(3), 153–168.
- Van Dyk, J., Barnett, R., Cygler, J. & Shragge, P. (1993), 'Commissioning and quality assurance of treatment planning computers', International Journal of Radiation Oncology* Biology* Physics **26**(2), 261–273.
- Van Dyk, J. & Van Dyk, J. (1999), The Modern Technology of Radiation Oncology : A Compendium for Medical Physicists and Radiation Oncologists, number vol. 1 in 'The Modern Technology of Radiation Oncology Series', Medical Physics Pub.

- Van Elmpt, W., McDermott, L., Nijsten, S., Wendling, M., Lambin, P. & Mijnheer, B. (2008), 'A literature review of electronic portal imaging for radiotherapy dosimetry', Radiotherapy and oncology **88**(3), 289–309.
- Verhaegen, F. & Seuntjens, J. (2003), 'Monte carlo modelling of external radiotherapy photon beams', Physics in medicine & biology **48**(21), R107.
- Walters, B., Kawrakow, I. & Rogers, D. (2002), 'History by history statistical estimators in the beam code system', Medical Physics **29**(12), 2745–2752.
- Welch, P. (1967), 'The use of fast fourier transform for the estimation of power spectra : a method based on time averaging over short, modified periodograms', IEEE Transactions on audio and electroacoustics **15**(2), 70–73.
- White, D., Griffith, R. & Wilson, I. (1992), 'Icru reports', Reports of the International Commission on Radiation Units and Measurements (1), 203–205.
- Wideröe, R. (1928), 'Über ein neues prinzip zur herstellung hoher spannungen', Archiv für Elektrotechnik **21**(4), 387–406.
- Wong, S. S. (2008), Introductory nuclear physics, John Wiley & Sons.
- Woo, M., Neider, J., Davis, T. & Shreiner, D. (1999), OpenGL programming guide : the official guide to learning OpenGL, version 1.2, Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc.
- Yang, D. (2000), C++ and object-oriented numeric computing for scientists and engineers, Springer Science & Business Media.
- Yang, M. C. (2014), Optimisation des plans de traitement en radiothérapie grâce aux dernières techniques de calcul de dose rapide, PhD thesis, Université Paris Sud-Paris XI.
- Young, P. (2015), Everything you wanted to know about data analysis and fitting but were afraid to ask, Springer.
- Yu, C. X. (1995), 'Intensity-modulated arc therapy with dynamic multileaf collimation : an alternative to tomotherapy', Physics in Medicine & Biology **40**(9), 1435.
- Zefkili, S., Kappas, C. & Rosenwald, J.-C. (1994), 'On-axis and off-axis primary dose component in high energy photon beams', Medical physics **21**(6), 799–808.

Résumé

La planification de traitement sur ordinateur est devenue un outil indispensable dans une chaîne moderne de traitement en radiothérapie externe, visant à perfectionner la qualité des traitements par rayonnement ionisant. Monte Carlo est la méthode la plus rigoureuse pour estimer la distribution de dose dans un volume irradié, modélisant l'aspect aléatoire du transport de particules. L'obstacle majeur empêchant son intégration dans la planification de traitement est le temps d'exécution extrêmement long. L'utilisation des espaces des phases dans la simulation Monte Carlo des accélérateurs linéaires médicaux, est l'une des solutions réputées réduisant de manière remarquable le temps de calcul, tout en préservant une précision comparable à celle d'une simulation complète. En revanche les espaces des phases ne peuvent générer qu'un nombre fini de particules, ce qui peut amplifier l'incertitude statistique lorsque le même espace des phases est recyclé plusieurs fois au cours d'une même simulation. Dans la première partie de cette thèse, nous présentons une approche sophistiquée pour la simulation des accélérateurs linéaires médicaux, basée sur le concept de modèle de sources virtuelles. Une reconstruction du faisceau permettra de reproduire ses caractéristiques sans avoir recours à la modélisation de chaque composante de l'accélérateur ni au transport de particules. Cette méthode est fondée sur l'étude des dépendances entre les différentes variables extraites des espaces des phases convertis sous forme de fonctions de densité de probabilité corrélées. Dans la deuxième partie, une fonction analytique jouant le rôle du collimateur multilames permettant de faire un filtrage de la fluence de particules a été introduite au modèle. Trois faisceaux de photons de deux configurations d'accélérateurs ont été étudiés pour valider l'approche. De bons résultats ont été obtenus en termes d'analyse γ_{index} , comparant les distributions de dose du modèle et des espaces des phases, calculées dans un fantôme d'eau voxélisé.

Mots-clefs— Accélérateur linéaire médical en mode photons ; Dose ; Geant4 ; Méthode de Monte Carlo ; Modèle de sources virtuelles.
