



HAL
open science

Calcul accéléré de la dose périphérique en radiothérapie

Valentin Champciaux

► **To cite this version:**

Valentin Champciaux. Calcul accéléré de la dose périphérique en radiothérapie. Physique Médicale [physics.med-ph]. Université Paris-Saclay, 2021. Français. NNT : 2021UPASP001 . tel-03153463

HAL Id: tel-03153463

<https://theses.hal.science/tel-03153463v1>

Submitted on 26 Feb 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Calcul accéléré de la dose périphérique en radiothérapie

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay

École doctorale n° 576, Particules, hadrons, énergie et
noyau : instrumentation, imagerie, cosmos et simulation
(Pheniics)

Spécialité de doctorat: Radio et hadron-thérapies
Unité de recherche: Université Paris-Saclay, CEA, Département
Métrologie Instrumentation et Information, 91191, Gif-sur-Yvette,
France

Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse présentée et soutenue à Saclay, le 14 janvier 2021, par

Valentin CHAMPCIAUX

Composition du jury:

Elias Khan Professeur des Universités, Université Paris-Saclay, IPNO	Président
Lorenzo Brualla Privatdozent, Universität Duisburg-Essen, WPE	Rapporteur, Examineur
Régine Gschwind Professeure des Universités, Université de Franche-Comté, Laboratoire Chrono-environnement	Rapporteur, Examinatrice
Emmanuel Busato Maître de conférence, Université Clermont Auvergne, LPC	Examineur
Nicolas Guillot Ingénieur R&D Mesures Nucléaires, Orano DS	Examineur
Dominique Tromson Ingénieure-chercheuse, CEA List	Directrice
Mathieu Agelou Ingénieur-chercheur, CEA List	Co-Encadrant
Juan-Carlo Garcia-Hernandez Ingénieur-chercheur, CEA List	Co-Encadrant

Calcul accéléré de la dose périphérique en radiothérapie

Valentin CHAMPCIAUX

Remerciements

Je voudrais insister, avant toute chose, sur le fait que si ma thèse a été pour moi une expérience enrichissante, c'est avant tout parce que j'ai pu la réaliser dans un environnement immensément bienveillant et en étant entouré de personnes exceptionnelles.

Je souhaiterais donc, en premier lieu, remercier Delphine Lazaro, à la tête du LM2S au moment de mon arrivée, pour m'avoir permis de passer ces 3 ans au sein de son laboratoire. Un grand merci à Dominique Tromson, ma directrice de thèse, notamment pour les longues relectures des chapitres du manuscrit et les nombreux coups de main administratifs, mais également pour m'avoir laissé une très grande autonomie dans mon travail.

Bien évidemment, je suis tout particulièrement reconnaissant envers les membres du jury, qui ont accepté de donner de leur temps en cette période mouvementée et inhabituelle de pandémie. Elias Khan, Lorenzo Brualla, Régine Gschwind, Emmanuel Busato, Nicolas Guillot : encore un immense merci à vous.

Tout naturellement, merci à mes deux encadrants, Mathieu Agelou et Juan-Carlos Garcia-Hernandez, pour tout leur accompagnement, leur patience, et le temps passé à suivre mon travail durant ces années.

Si le quotidien a été aussi agréable durant mon séjour au CEA, c'est sans nul doute également grâce au reste de l'équipe du LM2S : Anne-Catherine, Éric, Guillaume, Thomas, mais aussi ceux qui comme moi n'étaient que de passage : Anne-Laure, Nadia, Fedor. Les discussions au café vont me manquer, car même si je suis toujours discret, je n'en suis pas moins attentif ! J'espère que nous pourrons à l'occasion nous retrouver pour affronter Albert autour d'un délicieux Cabécou Coufit®. Merci à tous.

Une pensée également à tous les autres collègues du CEA que j'ai eu l'occasion de côtoyer, notamment Bénédicte, Johann (merci pour les spectres !), Sylvain pour nous avoir prêté du temps de tube RX, et Frédérick pour ses conseils avisés pour la soutenance. Merci Izabella pour toute l'entraide administrative au cours de ces trois ans. Finalement, il fallait bien deux personnes pour comprendre les procédures !

Merci à ma famille pour leur soutien bien sûr, à mes parents, Anaëlle, Arnaud et les lapinous. Et un grand merci à mes "tontons", notamment pour tout leur soutien logistique pendant des périodes difficiles.

Merci à Luc et Pierre, qui ont aussi été un soutien moral important, et surtout désolé de n'avoir rien fait exploser pendant ma thèse. C'est pas très fun, je sais, mais les radiations c'est cool aussi (si si je vous assure) !

Et bien sûr, par dessus tout, merci à ma Laura pour avoir toujours été là pour moi. ♥ Nous ne nous serions peut-être pas rencontrés si je n'avais pas fait cette thèse, et rien que pour cette raison, je ne pourrai jamais regretter ce choix ! Bien évidemment, je ne peux oublier de remercier Sunny pour m'avoir tenu compagnie durant la rédaction du manuscrit. Ton expertise de haut niveau en physique nucléaire et tes conseils avisés m'auront été extrêmement précieux, par contre tu ne m'as toujours pas expliqué comment tu sais tout ça...

Enfin, merci à toute personne lisant ce manuscrit, grâce à qui il a une raison d'exister autre que l'obtention d'un diplôme. J'espère que vous trouverez ce que vous êtes venu y chercher (et surtout pas trop de bêtises).

Table des matières

Remerciements	4
Table des matières	8
Liste des figures	9
Introduction générale	18
1 Vue d'ensemble de la radiothérapie	21
1.1 Introduction	21
1.2 Le cancer : épidémiologie, causes et traitement	21
1.2.1 Incidence du cancer	21
1.2.2 Apparition et caractéristiques de la maladie	23
1.2.3 Traitements et taux de guérison	25
1.3 Principe de la radiothérapie	27
1.3.1 Émission de rayonnements en radiothérapie externe	27
1.3.2 Destruction des cellules par ionisation	30
1.3.3 Techniques de radiothérapie	31
1.3.4 Étapes d'un traitement	36
1.4 Effets secondaires des rayonnements ionisants	37
1.4.1 Généralités	37
1.4.2 Effets secondaires stochastiques	38
1.4.3 Relation dose-effets	40
1.5 Conclusion	42
2 La dose hors-champ en radiothérapie	44
2.1 Introduction	44
2.2 Caractéristiques et conséquences de la dose périphérique	44
2.2.1 Origine et particularités	44
2.2.2 Influence des modalités d'irradiation sur la dose périphérique	50
2.2.3 Effets secondaires des techniques de radiothérapie avancées	53
2.3 Estimation de la dose hors-champ	55
2.3.1 Connaissance par mesures	55
2.3.2 Connaissance par calcul	59
2.4 Estimation de la dose hors-champ par la méthode Monte Carlo	62
2.4.1 Origine et principe de la méthode	62
2.4.2 Les codes Monte-Carlo en physique médicale	64
2.4.3 Problématique liée à la dose hors-champ	65
2.5 Conclusion	66
3 Estimations par la méthode Monte Carlo	68
3.1 Introduction	68
3.2 Définition des concepts utilisés	68
3.2.1 Estimation de l'espérance d'une variable aléatoire	68
3.2.2 Variance de l'estimateur d'espérance	69

3.2.3	Efficacité d'une simulation	70
3.3	Transport de particules par Monte-Carlo	70
3.3.1	Constitution d'une histoire	70
3.4	Méthodes de réduction de variance	73
3.4.1	Principe général	73
3.4.2	Splitting	74
3.4.3	Roulette Russe	76
3.4.4	Échantillonnage préférentiel	77
3.4.5	Échantillonnage systématique	78
3.5	Conclusion	82
4	Transport pseudo-déterministe : présentation et formalisation	83
4.1	Introduction	83
4.2	Choix de la méthode utilisée	83
4.3	Présentation du transport pseudo-déterministe	86
4.4	Construction et formalisation de la méthode	88
4.4.1	Problème à résoudre et choix de la marche à suivre	88
4.4.2	Échantillonnage d'une diffusion quelconque	90
4.4.3	Conditionnement de la direction de diffusion	92
4.4.4	Conditionnement du pas parcouru après diffusion	92
4.4.5	Traitement des particules complémentaires	93
4.4.6	Utilisation de l'échantillonnage préférentiel	94
4.4.7	Remarques	96
4.5	Échantillonnage de l'angle de diffusion	97
4.5.1	Expression des angles	97
4.5.2	Choix de la densité arbitraire	98
4.6	Considérations finales	99
4.6.1	Poids associé à la particule déterministe	99
4.6.2	Gestion des particules secondaires créées	100
4.6.3	Conditions d'application de la méthode	103
4.7	Conclusion	108
5	Implémentation de la méthode dans le code Phoebe	110
5.1	Introduction	110
5.2	Le code Monte-Carlo Phoebe	110
5.2.1	Présentation générale du code	110
5.2.2	Choix du code Phoebe	111
5.2.3	Utilisation et fichier d'entrée	111
5.3	Transport des particules dans le code Phoebe	113
5.3.1	Boucle principale du code	113
5.3.2	Échantillonnage du pas	116
5.3.3	Choix et réalisation d'une interaction	118
5.4	Algorithme d'implémentation de la méthode	120
5.4.1	Principe général de l'implémentation	120
5.4.2	Transport de la particule déterministe	121
5.4.3	Transport de la particule complémentaire	123

5.5	Fonction de création des particules déterministes	125
5.5.1	Vue d'ensemble de la fonction	125
5.5.2	Échantillonnage de la direction et de l'énergie	127
5.5.3	Calcul du poids initial	129
5.6	Conclusion	132
6	Techniques auxiliaires	134
6.1	Introduction	134
6.2	Principales faiblesses de la méthode	134
6.2.1	Sauts de variance	134
6.2.2	Particules de poids trop faibles	136
6.2.3	Faible probabilité de diffusion	138
6.2.4	Particules entrant dans la sphère sans diffusion	140
6.2.5	Particules traversant la sphère sans interagir	140
6.3	Techniques impactant le nombre de particules suivies	141
6.3.1	Roulette russe à l'entrée de la sphère	141
6.3.2	Splitting à l'entrée de la sphère	143
6.3.3	Roulette russe à la sortie de la sphère	144
6.3.4	Roulette russe à la création de la particule et aux interfaces	145
6.4	Procédés modifiant le nombre de particules créées	146
6.4.1	Génération d'une carte d'importance	146
6.4.2	Roulette russe basée sur la carte d'importance	151
6.4.3	Splitting de la création de particules	152
6.4.4	Incidence sur le nombre de particules créées et leur poids	153
6.5	Application à d'autres types d'interactions	155
6.5.1	Émissions par fluorescence	155
6.5.2	Annihilation et bremsstrahlung	156
6.5.3	Interaction Delta (effet photoélectrique)	156
6.6	Conclusion	157
7	Caractérisation et validation numérique du code	159
7.1	Introduction	159
7.2	Étude de l'effet du transport pseudo-déterministe sur la dose et l'efficacité	159
7.2.1	Tests préliminaires du transport pseudo-déterministe	159
7.2.2	Configuration de test automatisé	165
7.2.3	Résultats sans techniques auxiliaires	166
7.2.4	Effet des roulettes russes et splittings	168
7.2.5	Application aux différentes interactions produisant des photons	176
7.2.6	Version finale (toutes techniques appliquées)	183
7.3	Comparaison avec la méthode DXTRAN de MCNP	185
7.3.1	Configuration simulée	185
7.3.2	Résultats et commentaires	186
7.4	Conclusion	190

8	Validation expérimentale et application	192
8.1	Introduction	192
8.2	Dose hors-champ à basse énergie	192
8.2.1	Configuration étudiée	192
8.2.2	Spectre en énergie des photons	198
8.2.3	Profil de dose dans le champ	200
8.2.4	Mesure et estimation de la dose hors-champ	201
8.3	Application : dose hors-champ pour un accélérateur linéaire médical	207
8.3.1	Configuration expérimentale	208
8.3.2	Configuration de simulation	209
8.3.3	Mesure des profils de dose	211
8.3.4	Visualisation de l'origine des particules hors-champ	213
8.3.5	Estimation d'un profil de dose et ajustement de la géométrie	215
8.3.6	Profils en profondeur	226
8.3.7	Profils selon l'axe droite-gauche	230
8.4	Conclusion	237
	Conclusion générale et perspectives	241
	Annexes	242
A	Interactions des photons dans la matière	242
A.1	Effet photoélectrique	242
A.2	Diffusions Compton et Rayleigh	242
A.3	Création de paires	243
B	Utilisation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe	244
B.1	Définition du fichier d'entrée	244
B.2	Recommandations d'usage et commentaires	246

Table des figures

1	Comparaison du nombre de nouveaux cas de cancers en France entre 1990 et 2018 et causes de l'augmentation. Données issues de [Defossez <i>et al.</i> , 2019].	22
2	[CIRC, 2018] Nouveaux cas de cancers attribuables au mode de vie et à l'environnement chez les adultes de plus de 30 ans en 2015.	25
3	Un linac médical Elekta Versa HD™ utilisé pour la recherche sur la plateforme DOSEO du centre CEA de Saclay. Un fantôme anthropomorphe, à l'intérieur duquel des détecteurs sont insérés, est ici placé sur la table de traitement pour simuler un patient.	28
4	Représentation schématisée du bras d'un accélérateur linéaire médical.	28
5	[Cazoulat, 2013] Un collimateur multilame. Indispensable à la conformation du faisceau à la région à traiter, il équipe aujourd'hui la majorité des accélérateurs médicaux utilisés en radiothérapie.	29
6	Illustration du principe du fractionnement, en supposant qu'une proportion égale des cellules saines et tumorales d'origine sont détruites à chaque irradiation. La réparation des cellules saines étant plus performante, une différence se crée petit à petit entre les deux populations de cellules lorsque l'irradiation est délivrée par fractions.	31
7	Exemple de distribution de dose obtenue pour un traitement de la prostate pour la radiothérapie standard (a), la RC3D (b) et la RCMI (c). La couleur indique un pourcentage de la dose prescrite à la tumeur, la zone cible étant contourée en rouge [Colnot, 2019].	33
8	Illustration du principe du traitement par VMAT, dans lequel le bras de l'accélérateur tourne autour du patient durant l'irradiation. (source : www.itnonline.com/content/elektas-infinity-delivers-vmat)	33
9	Représentation d'un appareil de tomothérapie. La modalité associe une rotation du faisceau et une translation de la table de traitement. (source : www.pvhomed.com/treatment/tomotherapy)	34
10	Un appareil de stéréotaxie de type CyberKnife®, sur lequel un accélérateur linéaire miniaturisé est monté sur un bras robotisé. (source : www.deutsches-cyberknife-zentrum.de/en/cyberknife)	35
11	Diagramme représentant l'effet des rayonnements ionisants sur l'organisme selon le devenir de la cellule touchée.	37
12	Illustration des différentes modélisations possibles pour la relation entre la dose et le risque de cancer radio-induit.	41
13	Représentation des principales sources de rayonnement hors-champ en radiothérapie.	45
14	[Giessen and Hurkmans, 1993] Variation relative des différentes contributions à la dose périphérique en fonction de la distance au champ, pour un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$	46
15	[Shahban <i>et al.</i> , 2017] Évolution de la dose avec la distance au bord du champ, pour différentes profondeurs, dans le cas d'un fantôme d'eau irradié par une source de Cobalt 60 en champ $7 \times 7 \text{ cm}^2$. La valeur est donnée en pourcentage de la dose mesurée dans l'axe du faisceau pour chaque profondeur.	47

16	[Fraass and Geijn, 1983] Évolution de la dose avec la profondeur pour différentes tailles de champ, à 5 cm (a) et à 20 cm (b) du bord de champ, dans le cas d'un fantôme d'eau irradié par un faisceau de 10 MV ou une source de Cobalt 60. La valeur est donnée en pourcentage de la dose maximale mesurée sur l'axe du faisceau pour chaque taille de champ.	48
17	Illustration de l'effet de la taille du champ sur les diffusions dans le collimateur : un champ plus grand équivaut à une plus grande surface de diffusion vers les régions hors-champ.	49
18	[Kry <i>et al.</i> , 2017] Dose efficace (mSv/Gy) pour différents traitements en RCMI, en fonction de la distance au bord du champ. L'astérisque indique un traitement avec une forte modulation d'intensité, et les courbes continues représentent l'étendue empirique des doses périphériques associées à ces traitements.	51
19	[Kry <i>et al.</i> , 2017] Dose (mSv/Gy) pour différents traitements en stéréotaxie, en fonction de la distance au bord du champ. Les courbes continues représentent l'étendue empirique des doses périphériques associées aux traitements en RCMI (reportées de la figure 18).	52
20	[National Research Council, 1995] Taille de la cohorte nécessaire pour obtenir des résultats significatifs sur le risque de pathologies radio-induites en fonction de la dose reçue, en supposant un suivi tout au long de la vie. . . .	55
21	Exemples de fantômes anthropomorphes avec différents niveaux de détail. La radiographie de tels fantômes, en (c), montre la similitude des propriétés d'atténuation de leurs matériaux avec celles de véritables patients. (sources : (a) www.dicardiology.com (b,c) jrtassociates.com)	56
22	[Mille <i>et al.</i> , 2018] Comparaison des profils de dose obtenus par mesure, par simulation Monte-Carlo et par calcul via le TPS Eclipse (algorithmes AAA et Acuros XB), pour des tailles de champ 6×6 cm ² , à 5 et 10 cm de profondeur dans un fantôme d'eau pour un traitement à 6 MV.	60
23	Principe de fonctionnement d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires. Les nombres $g(r_i)$ sont équivalents à des tirages selon une loi uniforme. . . .	63
24	Illustration de la problématique de la dose hors-champ : le calcul du profil dans une cuve à eau, représentée en (a), montre l'augmentation rapide de l'incertitude sur le résultat (b) à mesure que l'on s'éloigne du faisceau.	65
25	Illustration de la méthode d'estimation de la dose déposée pour une particule source. La trajectoire des particules permet de visualiser les étapes d'obtention d'une réalisation de cette variable.	71
26	Illustration dans un cas simplifié du processus markovien de transport d'une particule par échantillonnages successifs.	72
27	[Thomas E. Booth and Martz, 2011] Le splitting est insuffisant pour les problèmes où la direction des particules est importante. Ici, le nombre de trajectoires est multiplié à la traversée de chaque région, mais les particules n'atteignent pas mieux la région en étoile.	84
28	[Bessières, 2013] Comparaison des profils de dose dans une cuve à eau pour un accélérateur GE SATURNE 43 en champ carré 10×10 cm ² , mesurés et simulés avec MCNPX et PENELOPE.	86

29	Schéma du principe de la méthode du transport pseudo-déterministe : lors d'une interaction, la particule déterministe est amenée jusqu'à la sphère d'intérêt tandis que la particule complémentaire est transportée de manière classique mais ne peut pas entrer immédiatement dans la sphère.	87
30	Diagramme des différents photons issus des partitionnements et conditionnements appliqués à la direction de diffusion puis au pas de la particule. Les éléments en rouge correspondent à des variables conditionnelles, et les éléments en bleu correspondent à des variables complémentaires.	89
31	Représentation du principe du transport pseudo-déterministe avec les différents angles utilisés.	97
32	Schéma du principe du transport pseudo-déterministe avec utilisation d'une densité de probabilité arbitraire en escalier pour le choix de l'angle de diffusion. Une seconde sphère, incluse dans la première, délimite une zone dans laquelle les diffusions sont favorisées.	98
33	Schéma des possibilités de gestion des particules secondaires. La figure de gauche représente la situation par défaut, dans laquelle chaque particule est associée à une particule secondaire. La méthode utilisée, illustrée à droite, consiste à suivre de manière analogue les particules secondaires créées par le photon complémentaire.	101
34	Illustration d'une estimation de <i>pulse height</i> , donnant la fréquence des dépôts pour chaque intervalle en énergie.	104
35	Illustration dans un milieu infini d'une situation possible pour l'application du transport pseudo-déterministe pour l'estimation de la hauteur d'impulsion.	106
36	Exemple de suivi de particules secondaires. Ici, les interactions du photon primaire P1 créent les électrons secondaires E1 puis E2. L'électron E1 est suivi en premier, et produit le photon P2. Celui-ci ne sera cependant suivi qu'après l'électron E2.	114
37	Diagramme simplifié de la boucle de transport du code Phoebé.	115
38	Illustration du principe de la méthode du <i>random hinge</i> . L'électron continue sa trajectoire en ligne droite avant de subir une diffusion ou <i>hinge</i> , puis termine son pas.	118
39	Illustration de l'échantillonnage du choix de l'interaction. La valeur du nombre aléatoire r détermine l'interaction à réaliser.	119
40	Représentation des différentes grandeurs utilisées durant le transport de la particule déterministe et de la particule complémentaire.	121
41	Diagramme de la boucle de transport pour une particule déterministe.	122
42	Diagramme de la boucle de transport pour une particule complémentaire.	124
43	Diagramme de la fonction chargée de l'attribution du statut "Complémentaire" à la particule actuelle et de la création de la particule déterministe.	126
44	Représentation de la densité de probabilité de la variable échantillonnée. Les paliers représentent respectivement un tirage vers la sphère externe ou vers la sphère interne. Leur hauteur dépend de la valeur de Q , tandis que la position de leur séparation dépend du rayon de la sphère interne.	128
45	Représentation des angles de diffusion en jeu dans le calcul du poids de la particule déterministe. L'angle θ est échantillonné, puis l'angle θ' est calculé pour évaluer la valeur de $f(\mu)$	130

46	Configuration de simulation (cuve à eau) pour l'observation de sauts de variance. La dose est estimée dans une sphère confondue avec la sphère interne du transport pseudo-déterministe.	135
47	Incertitude en fonction du temps de simulation dans un exemple d'illustration des sauts de variance au cours d'une simulation courte.	136
48	Visualisation de la configuration de simulation pour l'étude des poids entrant dans la sphère.	137
49	Distribution entre 10^{-6} et 0,02 des poids des particules entrant dans la sphère pseudo-déterministe dans la configuration de test de la figure 48 (taille de bin constante de 10^{-6}).	138
50	Évolution du nombre de diffusions par histoire en fonction de l'énergie de la source entre 10 keV et 20 MeV, dans la configuration de test de la figure 48. . .	139
51	Distribution des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test de la figure 48, après application de la roulette à l'entrée de la sphère (taille de bins 10^{-6}).	142
52	Distribution des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test de la figure 48, après application de la roulette et du splitting (taille de bins 10^{-6}).	144
53	Visualisation de la configuration de simulation pour l'étude des roulettes liées à la carte d'importance.	147
54	Carte du nombre de particules déterministes créées en fonction de la position dans l'espace pour la configuration de test de la figure 53 (voxels sommés selon l'axe avant-arrière)	148
55	Carte du poids total apporté à la sphère par les particules déterministes en fonction de la position de leur création pour la configuration de test de la figure 53 (voxels sommés selon l'axe avant-arrière, échelle logarithmique) . . .	149
56	Carte du poids apporté à la sphère par particule créée, en fonction de la position de leur création (voxels sommés selon l'axe avant-arrière). La région vide (en blanc) entourant la cuve ne contient aucune donnée puisque aucune particule n'y a été créée.	150
57	Cartes du nombre de particules créées en fonction de la position après application de la roulette (a) et du couple roulette-splitting (b) via la carte d'importance (voxels sommés selon l'axe avant-arrière, taille 500×500 voxels).	153
58	Carte du poids apporté à la sphère par particule créée, en fonction de la position après application de la roulette (a) et du couple roulette-splitting (b) via la carte d'importance (voxels sommés selon l'axe avant-arrière, taille 500×500 voxels).	154
59	Illustration de la configuration utilisée pour valider le bon fonctionnement de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.	160
60	Exemple de traces des particules analogues et déterministes et leur poids associé, pour l'émission de 100 photons primaires dans la configuration de la figure 59.	161
61	Exemple de l'effet du transport pseudo-déterministe sur une carte de dose et sur la carte d'incertitude associée dans la configuration de la figure 59 (500×500 pixels, une coupe d'un centimètre est réalisée au centre de l'axe avant-arrière).	162

62	Illustration de la configuration de test utilisée pour l'estimation d'un profil de dose lors de la validation du bon fonctionnement de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.	163
63	Exemple d'un profil de dose calculé dans la configuration de la figure 62, sans (a) et avec (b) le transport pseudo-déterministe. La courbe en vert est le résultat analogue obtenu sur un temps 4800 fois plus important.	163
64	Évolution de l'incertitude relative sur la dose estimée le long d'un profil dans la configuration de la figure 62, avec et sans le transport pseudo-déterministe.	164
65	Schéma de la configuration utilisée pour les tests des différentes versions de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.	165
66	Distribution entre 10^{-7} et 10^{-1} des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test décrite en 7.2.2, pour une sphère de 5 cm de rayon placée à 35 cm et à 100 cm de l'axe d'un faisceau de photons de 100 keV (taille des bins : 10^{-7}).	169
67	Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur l'émission de photons par bremsstrahlung.	179
68	Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur l'émission de photons par fluorescence (les dimensions ne sont pas à l'échelle).	180
69	Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur les photons survivant à un effet photoélectrique.	182
70	Illustration de la configuration de test utilisée pour la comparaison du transport pseudo-déterministe dans MCNP et Phoebe.	186
71	Énergie déposée par particule source dans la sphère de la configuration de la figure 70 pour des énergies de 100 keV à 10 MeV, dans Phoebe et MCNP en simulation analogue.	187
72	Énergie déposée par particule source dans la sphère de la configuration de la figure 70 pour des énergies de 100 keV à 10 MeV, en utilisant le transport pseudo-déterministe dans Phoebe et MCNP.	188
73	Gain d'efficacité apporté par l'usage du transport pseudo-déterministe et DXTRAN, respectivement pour Phoebe et MCNP, pour les estimations réalisées dans la configuration de la figure 70 entre 100 keV et 10 MeV.	189
74	Configuration expérimentale utilisée pour la validation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe, composée d'une casemate de plomb surmontée d'une source de rayons X.	193
75	Film GAFchromic™ EBT-3 placé perpendiculairement au faisceau et irradié à l'aide du tube Oxford Trinity.	194
76	Détecteur semi-conducteur CdTe utilisé pour la mesure du spectre en énergie des photons (a), placé dans la casemate de plomb et surmonté de son système de collimation (b).	195
77	Détecteur Radcal AGMS-D+ utilisé pour les mesures de dose dans le champ.	196
78	Chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer utilisée pour les mesures de dose hors-champ.	196
79	Représentation en coupe verticale de la casemate et de la modélisation du tube Oxford Trinity.	197

80	Représentation en coupe horizontale de la casemate et du renforcement de plomb à son entrée.	197
81	Spectres en énergie des photons émis par le tube Oxford Trinity, mesuré et simulé à l'aide de Phoebé.	198
82	Détecteur CdTe placé hors-champ sans collimation ni banc motorisé pour la mesure du spectre en énergie des photons.	199
83	Spectres en énergie des photons hors du champ dans l'enceinte de plomb de la configuration de la figure 79, mesuré et simulé avec Phoebé.	200
84	Profil de dose mesuré, et simulé avec Phoebé dans la configuration de la figure 79.	201
85	Emplacements dans la casemate de la chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer utilisée pour la mesure de dose hors-champ.	202
86	Représentation des distances traversées dans la chambre d'ionisation par des photons perpendiculaires à sa surface en (a) et présentant un angle d'incidence α en (b).	204
87	Carte d'incertitude relative sur la dose obtenue avec le transport pseudo-déterministe au niveau de la chambre d'ionisation pour la position 1 de la figure 85, pour laquelle l'air a été remplacé par de l'eau pour faire apparaître les trajectoires des photons subissant un splitting important.	205
88	Configuration utilisée pour estimer l'énergie moyenne déposée par électron Compton et par photoélectron dans la chambre d'ionisation.	206
89	Configuration de mesure avec cuve centrée en (a) et cuve décalée en (b) pour des mesures selon l'axe tête-pieds.	208
90	Coupe verticale et direction tête-pieds de la géométrie de l'accélérateur utilisée pour les simulations.	209
91	Représentation de la géométrie de la cuve à eau utilisée pour les simulations et de sa position relative à l'accélérateur en coupe verticale en (a), et en coupe horizontale à la profondeur de référence en (b).	210
92	Spectre en énergie des photons estimé par simulation dans une sphère de 3 cm de rayon placée à 45 cm de l'axe du faisceau et à 30 cm de profondeur dans la cuve à eau de la figure 91.	211
93	Profils de dose mesurés à 5, 10, 20 et 30 cm de profondeur dans la cuve à eau à l'aide de la chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer, selon l'axe Y de la figure 91 dans la configuration décrite en 8.3.1.	212
94	Profils de dose mesurés à 5, 10, 20 et 30 cm de profondeur dans la cuve à eau à l'aide de la chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer, selon l'axe X dans la configuration décrite en 8.3.1, avec rotation de 90 degrés de la tête de l'accélérateur.	213
95	Carte des contributions en poids de chaque voxel (sommés selon l'axe avant-arrière d'une grille de 1000×1000×1000 voxels) dans la configuration décrite en 8.3.1, pour une sphère placée à 15 cm de l'axe du faisceau et 30 cm de profondeur dans la cuve.	214
96	Carte des contributions en poids de chaque voxel (sommés selon l'axe avant-arrière d'une grille de 1000×1000×1000 voxels) dans la configuration décrite en 8.3.1, pour une sphère placée à 45 cm de l'axe du faisceau et 5 cm de profondeur dans la cuve.	215

97	Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur par défaut, comparés au profil mesuré. Les limites de la sphère sont représentées en pointillés.	216
98	Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur par défaut.	217
99	Illustration de l'effet géométrique influant potentiellement sur le profil de dose lorsque le MLC n'est plus traversé par les photons.	218
100	Bloc de PbSb ₄ accolé au MLC.	219
101	Représentation de la géométrie utilisée pour la simulation après l'ajout de blocs de plomb (en noir) de chaque côté du MLC, destinés à reproduire l'effet des blocs de PbSb ₄ présents en réalité (figure 100).	220
102	Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, comparés au profil mesuré.	220
103	Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb.	221
104	Représentation d'une coupe horizontale du MLC dans la géométrie par défaut de l'accélérateur en (a), et après ajout des blocs de plomb et décalage des lames situées hors du champ en (b). Les mâchoires, situées sous le MLC, sont représentées en pointillés. L'axe des profils réalisés est ici l'axe haut-bas.	222
105	Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb et un décalage des lames situées en dehors du champ, comparés au profil mesuré.	222
106	Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb et pour laquelle l'écart entre les lames du MLC est corrigé.	223
107	Représentation de la géométrie utilisée pour la simulation après ajout des cylindres d'acier (en gris clair) entourant la majorité des éléments de la tête de l'accélérateur.	224
108	Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	225
109	Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, pour laquelle l'écart entre les lames du MLC est corrigé, et après l'ajout de la protection autour de la tête.	226

110	Profils de dose à 10 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	227
111	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 10 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	227
112	Profils de dose à 20 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	228
113	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 20 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	228
114	Profils de dose à 30 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	229
115	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 30 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	229
116	Profils de dose à 5 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	230
117	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 5 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	231
118	Profils de dose à 10 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	232
119	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 10 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	233

120	Profils de dose à 20 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	234
121	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 20 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	235
122	Profils de dose à 30 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.	236
123	Écarts entre les profils simulés et mesurés à 30 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.	237
124	Représentation schématisée de l'effet photoélectrique suivi d'une réorganisation des couches électroniques de l'atome touché.	242
125	Représentation schématisée de la diffusion Rayleigh en (a) et de la diffusion Compton en (b) d'un photon sur un électron atomique.	243
126	Représentation schématisée du processus de création de paire électron-positon, suivi d'une annihilation du positon avec un nouvel électron.	244
127	Exemple de paramétrage du transport pseudo-déterministe dans Phoebe au format <i>.json</i>	246

Introduction générale

Même s'il est de mieux en mieux soigné, le nombre de cancers est en augmentation depuis de nombreuses années et il est aujourd'hui un enjeu majeur de santé publique. La radiothérapie, qui utilise des rayonnements ionisants pour détruire les cellules tumorales, est l'un des principaux traitements pour cette maladie. Connus comme une arme à double tranchant, ces rayonnements, même à faible dose, peuvent induire un risque d'effets secondaires à long terme important qui peut dans certains cas contrebalancer le bénéfice de la thérapie. En particulier, les doses dites «hors-champ» ou périphériques, correspondant à l'ensemble des irradiations en dehors de la région de traitement, présentent des niveaux faibles mais couvrent d'importants volumes sains. En conséquence, elles sont liées à une augmentation, suite à un traitement, des risques de cancers secondaires et d'autres maladies d'origine génétique. Par ailleurs, on s'aperçoit récemment que les techniques de radiothérapie les plus modernes, pour lesquelles les doses importantes sont de plus en plus focalisées sur la tumeur, peuvent pourtant présenter des niveaux de dose périphérique bien plus élevés que leur contrepartie conventionnelle et sont donc potentiellement liées à un risque accru d'effets secondaires à long terme.

Pour des raisons de prévention, de suivi et d'amélioration des traitements, il devient de plus en plus important d'être en mesure de calculer précisément ces doses hors-champ. Toutefois, les outils actuels ne permettent pas de réaliser ce calcul. En particulier, les logiciels de planification de traitement à partir desquels l'irradiation est administrée ne calculent aucune dose en périphérie du champ. Les codes utilisant la méthode Monte-Carlo simulent le transport des particules dans la matière, leurs interactions et leurs déplacements, en suivant le plus précisément possible les lois de la physique. Ils sont ainsi reconnus comme étant les plus précis pour ce type de calcul, sous réserve d'une modélisation fidèle de l'environnement d'irradiation, et pourraient être utilisés pour estimer de manière fiable cette dose. Ils se heurtent néanmoins à une difficulté majeure : le temps nécessaire au calcul est très important et même souvent prohibitif, à cause de l'importante variance de la dose périphérique. Ce calcul ne peut donc se faire qu'à l'aide de méthodes de réduction de variance, destinées à accélérer l'estimation des doses hors-champ en modifiant la manière dont sont transportées les particules. Une technique prometteuse est la méthode du transport pseudo-déterministe, destinée à augmenter le nombre de particules présentes dans une région de l'espace en créant, lors des diffusions des photons, de nouvelles particules qui sont amenées directement à la région périphérique où la dose est estimée et réduisant ainsi la variance.

L'objectif de cette thèse est donc d'implémenter cette méthode dans un code de simulation Monte-Carlo utilisé en radiothérapie, de manière à lui permettre de calculer les doses hors-champ rapidement. Dans un premier temps, cela requiert d'étudier la méthode de manière approfondie : bien qu'elle puisse être vue comme une composition d'autres méthodes plus basiques, il n'existe en effet que très peu de documentation qui lui est relative, et certains points nécessaires à son implémentation restent à examiner. Une fois la méthode ajoutée au code de simulation choisi, elle doit ensuite être testée et évaluée pour déterminer si elle permet d'accélérer suffisamment le calcul des doses périphériques.

Le chapitre 1 est destiné à donner de manière très générale le contexte dans lequel se place ce travail, indispensable pour comprendre son importance. Il décrit notamment les mécanismes d'apparition du cancer et le lien qu'ils entretiennent avec la radiothérapie qui, nous le verrons, est susceptible de favoriser ou de causer son apparition via des altérations

du code génétique. Le principe et l'action curative de la radiothérapie sur l'organisme sont rappelés dans la seconde partie, suivie d'un bilan des connaissances actuelles concernant les effets secondaires des rayonnements ionisants utilisés.

Le chapitre 2 est entièrement dédié à dresser un état de l'art concernant les doses hors-champ. Nous verrons quelles sont leurs caractéristiques et comment les modalités d'irradiation influencent via ces doses le risque d'effet secondaire à long terme. Nous nous intéresserons ensuite aux méthodes permettant d'estimer ces doses au cours d'un traitement : d'abord par mesures, à l'aide de dosimètres, puis par calcul à l'aide de codes de type analytique. Enfin, la dernière section est plus spécifiquement dédiée à l'estimation des doses hors-champ par la méthode Monte-Carlo et aux difficultés rencontrées avec cette approche. Nous verrons notamment pourquoi les méthodes de réduction de variance sont souvent nécessaires pour ce type d'estimation, pour lesquelles le temps nécessaire peut être extrêmement important.

Le chapitre 3 est une introduction au formalisme utilisé par la suite dans ce travail, et présente les concepts mathématiques, liés à la méthode Monte-Carlo, utilisés dans les chapitres suivants. Après une définition des grandeurs au cœur de la méthode, la seconde section traite plus spécifiquement du transport de particules, qui est le procédé utilisé pour réaliser des estimations de dose en radiothérapie. Enfin, la dernière partie aborde les méthodes de réduction de variance de manière générale et en donne des exemples formalisés qui seront utilisés par la suite.

Le chapitre 4 est consacré à la formalisation de la méthode du transport pseudo-déterministe, une méthode de réduction de variance particulière qui devrait permettre de réaliser des calculs de dose hors-champ dans un temps raisonnable. Après une courte présentation, la méthode est construite pas à pas à partir de techniques de base. Cette formalisation permet de mieux comprendre le fonctionnement de la méthode, de s'assurer qu'elle n'introduit aucun biais dans les estimations réalisées, et de poser les fondations d'une implémentation dans un code de simulation Monte-Carlo.

Le chapitre 5 est une description de la manière dont la méthode du transport pseudo-déterministe a été ajoutée au code Phoebe, précédée des raisons pour lesquelles ce code a été choisi. Après une présentation du code et de son fonctionnement, l'algorithme implémenté est détaillé en deux parties : d'abord une description du transport de chaque type de particule, déterministe et complémentaire, puis une présentation de la fonction permettant les échantillonnages relatifs à la particule déterministe.

Le chapitre 6, quant à lui, décrit les méthodes dites «auxiliaires». Ces méthodes sont des techniques de réduction de variance ajoutées par la suite au transport pseudo-déterministe pour améliorer son efficacité. Nous verrons d'abord pourquoi ces dernières sont nécessaires, puis comment elles ont été implémentées à diverses étapes du transport des particules. Les trois dernières sections traitent ainsi respectivement des techniques appliquées durant le transport des particules déterministes, avant leur création, puis au moment de la création de nouveaux photons en dehors des diffusions.

Une fois la méthode entièrement décrite, le chapitre 7 présente les résultats obtenus pour les tests numériques du code et de la méthode dans diverses conditions. Ces tests ont un double objectif : d'abord vérifier de manière concrète l'absence de biais dans la simulation, et ensuite évaluer l'apport du transport pseudo-déterministe sur les estimations de dose hors-champ. La dernière section présente notamment une rapide comparaison avec la méthode DXTRAN du code MCNP.

Le chapitre 8 est dédié à la validation expérimentale et à l'application du code validé. Une première partie compare aux résultats du code des mesures réalisées dans une casemate surmontée d'une source de photons de basse énergie, dans un cas où l'estimation est impossible sans réduction de variance. La dernière partie est un cas concret d'utilisation du transport pseudo-déterministe : un modèle d'accélérateur linéaire médical Elekta Versa HD est utilisé pour le calcul des doses dans le champ d'irradiation, mais est inadéquat pour l'estimation des doses à distance de celui-ci. La réduction de variance permet d'obtenir rapidement un profil de dose sur une région étendue, qui lui-même permet la correction du modèle d'accélérateur.

Enfin, le manuscrit se termine par une conclusion générale de l'ensemble des travaux réalisés au cours de cette thèse, puis une présentation des perspectives qui en ressortent.

1 Vue d'ensemble de la radiothérapie

1.1 Introduction

Ce premier chapitre vise à donner un panorama de la radiothérapie, les raisons de son utilisation, ses effets sur le corps, ainsi qu'un aperçu des différentes techniques d'irradiation qui existent à ce jour. Il a pour objectif de présenter la problématique liée à la dose hors-champ, qui est à l'origine d'effets secondaires indésirables malgré l'évolution constante des traitements.

La première section donne quelques éléments de compréhension sur la nature et les causes du cancer, qui est aujourd'hui très largement la principale maladie traitée par radiothérapie, mais qui figure également parmi les effets à long terme de cette dernière puisque les rayonnements utilisés pour soigner les patients sont potentiellement cancérigènes. Après une vue d'ensemble du cancer au niveau épidémiologique, destinée à montrer pourquoi il est une préoccupation de plus en plus essentielle pour la santé publique, la première section de ce chapitre décrit succinctement ses mécanismes biologiques d'apparition. Ils sont, en effet, étroitement liés aux risques d'effets secondaires à long terme de la radiothérapie, et notamment ceux causés par la dose périphérique dont le calcul fait l'objet de cette thèse. Cette première section donne, finalement, quelques éléments concernant les différents traitements possibles et les taux de guérison actuels.

La seconde section de ce chapitre se concentre uniquement sur la radiothérapie, et décrit son principe et ses modalités depuis l'émission de particules ionisantes jusqu'à la manière dont elles permettent de contrôler ou d'éliminer une tumeur. Un traitement par radiothérapie peut aujourd'hui être réalisé grâce à de nombreuses techniques qui améliorent sa précision ; la fin de la section décrit ainsi ces différentes modalités et le déroulement classique d'un traitement.

Finalement, la troisième et dernière section concerne les effets secondaires de la radiothérapie. L'évolution des traitements améliore la conformation du faisceau de particules à la tumeur, mais au prix d'une augmentation de l'irradiation dans les régions périphériques. Des effets indésirables peuvent alors apparaître et mettre en péril le pronostic à long terme du patient. En particulier, il existe un risque non négligeable de développement d'un cancer secondaire, mais d'autres pathologies liées à l'irradiation peuvent également apparaître même des dizaines d'années après la fin d'un traitement et pour des doses relativement faibles reçues par le patient. De plus, la relation entre les faibles doses et les effets à long terme du traitement reste encore aujourd'hui très incertaine. Cette section montre ainsi pourquoi il existe actuellement un besoin important de données épidémiologiques concernant les faibles doses.

1.2 Le cancer : épidémiologie, causes et traitement

1.2.1 Incidence du cancer

Le cancer est actuellement la seconde cause de mortalité dans le monde [Fitzmaurice *et al.*, 2017], et, depuis 1999 pour les femmes et 1988 pour les hommes, il est la première cause de mortalité en France [Mazuy *et al.*, 2016]. L'Institut National du Cancer (INCa) estime à 382 000 le nombre de nouveaux cas apparus en France en 2018, année durant laquelle 157 000 décès sont attribuables au cancer [INCa, 2019]. Ce premier chiffre est par ailleurs en

augmentation importante depuis plusieurs dizaines d'années. La figure 1, ci-dessous, donne une comparaison du nombre de nouveaux cas de cancer entre 1990 et 2018.

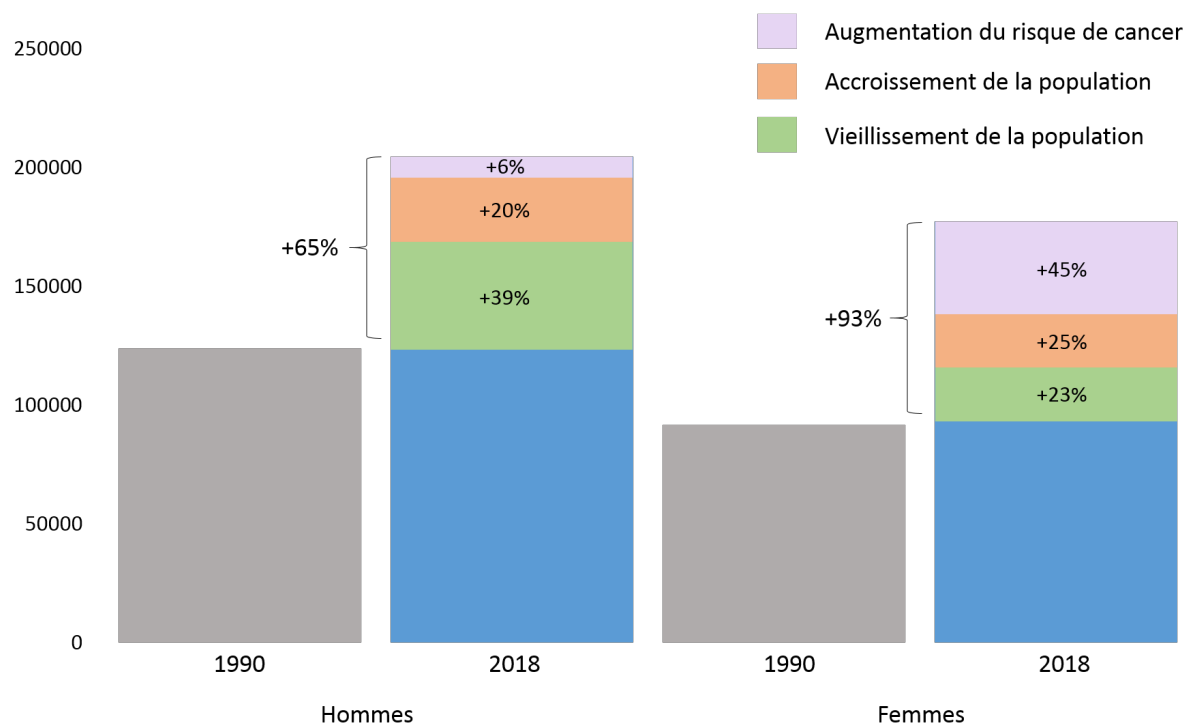


FIGURE 1 – Comparaison du nombre de nouveaux cas de cancers en France entre 1990 et 2018 et causes de l'augmentation. Données issues de [Defossez *et al.*, 2019].

Le nombre de nouveaux cas s'est accru de 65 % chez l'homme, dont 20 % seraient dus à l'accroissement de la population, 39 % à son vieillissement et 6 % à l'augmentation du risque de cancer lui-même. Chez la femme, l'augmentation est de 93 % par rapport à 1990, dont 25 % dus à l'accroissement de la population, 23 % à son vieillissement, et 45 % à l'augmentation du risque de cancer [Defossez *et al.*, 2019]. Ces derniers chiffres mettent notamment en avant la grande disparité du risque d'apparition d'un cancer selon la catégorie d'âge via l'importance du vieillissement de la population : pour les femmes et les hommes, respectivement, les âges médians d'apparition d'un cancer sont de 68 et 67 ans. Malgré leur rareté, les cancers pédiatriques existent également et représentent 1 à 2 % des cas (environ 2550 nouveaux cas chaque année). L'INCa estime qu'en moyenne un enfant sur 440 est touché par un cancer avant l'âge de 15 ans.

Ci-dessous, le tableau 1 présente l'incidence et la mortalité pour les types de cancers les plus répandus.

TABLE 1 – Incidence et mortalité en 2018 des types de cancers les plus communs.

Hommes			Femmes		
Type de cancer	Incidence	Mortalité	Type de cancer	Incidence	Mortalité
Prostate	50 000 ¹	8 000	Sein	58 000	12 000
Poumon	31 000	23 000	Colorectal	20 000	8 000
Colorectal	23 000	9 000	Poumon	15 000	10 000

Les cancers les plus fréquents chez l'homme sont le cancer de la prostate, suivi du cancer du poumon, puis du cancer colorectal. La mortalité, en revanche, est largement plus élevée pour le cancer du poumon, suivi du cancer colorectal, puis du cancer de la prostate. Chez la femme, le cancer du sein est le plus fréquent et cause le plus de décès. Le second type le plus fréquent est le cancer colorectal (en troisième position pour la mortalité), suivi du cancer du poumon (seconde position pour la mortalité) [INCa, 2019].

En 2017, en France, 3,8 millions de personnes ont un cancer ou ont été touchées par un cancer au cours de leur vie. Cette prévalence est en augmentation du fait de l'amélioration du taux de survie et de la hausse du nombre de nouveaux cas annuels. Fitzmaurice et al. estiment qu'un homme a environ une chance sur trois de développer un cancer au cours de sa vie, et une femme une chance sur quatre [Fitzmaurice et al., 2017]. L'ensemble de ces données témoignent de la considérable importance qu'a prise cette maladie, depuis de nombreuses années, en tant qu'enjeu de recherche et de santé publique, autant au niveau de la prévention que du traitement.

1.2.2 Apparition et caractéristiques de la maladie

Mécanisme biologique d'apparition

L'apparition du cancer résulte d'une altération de la capacité de division des cellules du corps. Cette multiplication, indispensable à la formation des organes et à leur réparation, est normalement contrôlée par l'organisme via des signaux biologiques qui l'activent ou l'inhibent lorsque nécessaire. Or, il peut arriver qu'une cellule, par des mutations aléatoires de son ADN [Kastan, 2008], acquière la capacité de se répliquer indépendamment des signaux envoyés par l'organisme et perde alors le contrôle de sa multiplication [Stratton et al., 2009]. Si les mutations le permettent, elle peut former une tumeur, qui est constituée d'un amas de cellules de même origine et possédant la même anomalie. Toutefois, une multiplication désordonnée des cellules ne signifie pas nécessairement l'apparition d'un cancer : dans ce cas, l'organisme déclenche la mort des cellules lorsque leur capacité de division est trop altérée. Il existe de nombreux mécanismes de défense et de réparation, eux aussi codés dans l'ADN, capables d'empêcher la formation d'une tumeur. Les gènes responsables de ces mécanismes sont appelés « suppresseurs de tumeurs », et peuvent notamment déclencher la mort de la cellule lorsque le nombre de mutations subies est trop important, évitant ainsi une accumulation qui pourrait aboutir à l'apparition d'un cancer.

Or, parmi la population cellulaire d'une tumeur, un mécanisme d'évolution, semblable à la sélection naturelle, se met en place [Nowell, 1976]. Dans cette population de même code génétique, des mutations peuvent survenir à nouveau et ainsi faire apparaître plusieurs

sous-populations ; celles contenant les cellules les plus à même de survivre et de se reproduire au sein de l'organisme prennent le dessus sur les autres. Ce mécanisme accroît petit à petit la dangerosité de la tumeur, qui acquiert au fil du temps davantage de capacités lui permettant d'échapper à la régulation de l'organisme jusqu'à devenir un cancer. On retrouve dans la plupart des cas les mêmes modifications du comportement cellulaire [Hanahan and Weinberg, 2000] :

- Indépendance vis-à-vis des signaux ordonnant la division cellulaire,
- Indépendance vis-à-vis des signaux inhibant la division cellulaire,
- Perte de la capacité d'apoptose (auto-destruction),
- Perte de la capacité de sénescence (limite dans le nombre de divisions possibles),
- Capacité à favoriser la création de vaisseaux sanguins pour s'alimenter,
- Capacité d'envahir les tissus voisins,
- Capacité de créer des métastases.

Avant tout, le cancer est caractérisé par une perte de la capacité à corriger les erreurs de réplication de l'ADN. Les mécanismes de défense et de réparation ne sont, en effet, pas infaillibles : étant codés dans l'ADN, ils sont également sensibles aux mutations génétiques et sont susceptibles d'être inactivés par certaines d'entre elles ; c'est d'ailleurs ce que l'on constate pour la plupart des personnes touchées par la maladie. L'apparition d'un cancer résulte donc d'une accumulation importante de mutations génétiques aléatoires, qui causent progressivement la défaillance des systèmes de régulation de la prolifération cellulaire. Cette accumulation se fait tout au long de la vie, et plusieurs dizaines d'années peuvent s'écouler entre la première mutation et l'apparition d'un cancer, expliquant en partie sa manifestation généralement tardive.

Origine des mutations génétiques

Les mutations génétiques surviennent naturellement dans l'organisme, en particulier lors de la réplication de l'ADN au cours de laquelle des erreurs peuvent se produire. On estime notamment qu'environ trois mutations surviennent lors de chaque division d'une cellule souche [Lynch, 2010]. En 2017, Tomasetti et al. rapportent que la proportion de cancers dus aux erreurs de réplication de l'ADN est d'environ 66% au niveau mondial [Tomasetti *et al.*, 2017]. Certaines mutations sont également héréditaires, et peuvent être déjà portées par les gènes à la naissance, causant une prédisposition à l'apparition d'un cancer, qui nécessitera alors moins de mutations aléatoires pour s'établir [Mucci *et al.*, 2016]. En revanche, un certain nombre de facteurs externes peuvent causer l'apparition de nouvelles mutations : il s'agit, notamment, des substances mutagènes d'origine chimique [Loeb and Harris, 2008], biologique (notamment certains virus [Carrillo-Infante *et al.*, 2007] et certaines bactéries [Handa *et al.*, 2011]), ainsi que des rayonnements ionisants, incluant les ultraviolets [Kanavy and Gerstenblith, 2011]. Contrairement au risque dû aux mutations survenant naturellement dans l'organisme, pour lesquelles seul le temps cause une accumulation d'anomalies, plus l'exposition à ces facteurs est importante au cours de la vie, plus la probabilité d'accumuler des mutations pouvant conduire à un cancer est élevée.

Parmi ces facteurs, certains sont directement liés au mode de vie : le Centre international de recherche sur le cancer (CIRC), en 2018, estime que 41% des nouveaux cas de cancers en

France (soit 142 000 cas) sont attribuables au mode de vie et pourraient ainsi être, en théorie, évités [CIRC, 2018]. Dans son rapport de 2018, le CIRC expose le nombre de nouveaux cas de l'année 2015 attribuables à chaque facteur de risque lié au mode de vie et à l'environnement. Ce résultat est présenté ci-dessous en figure 2.

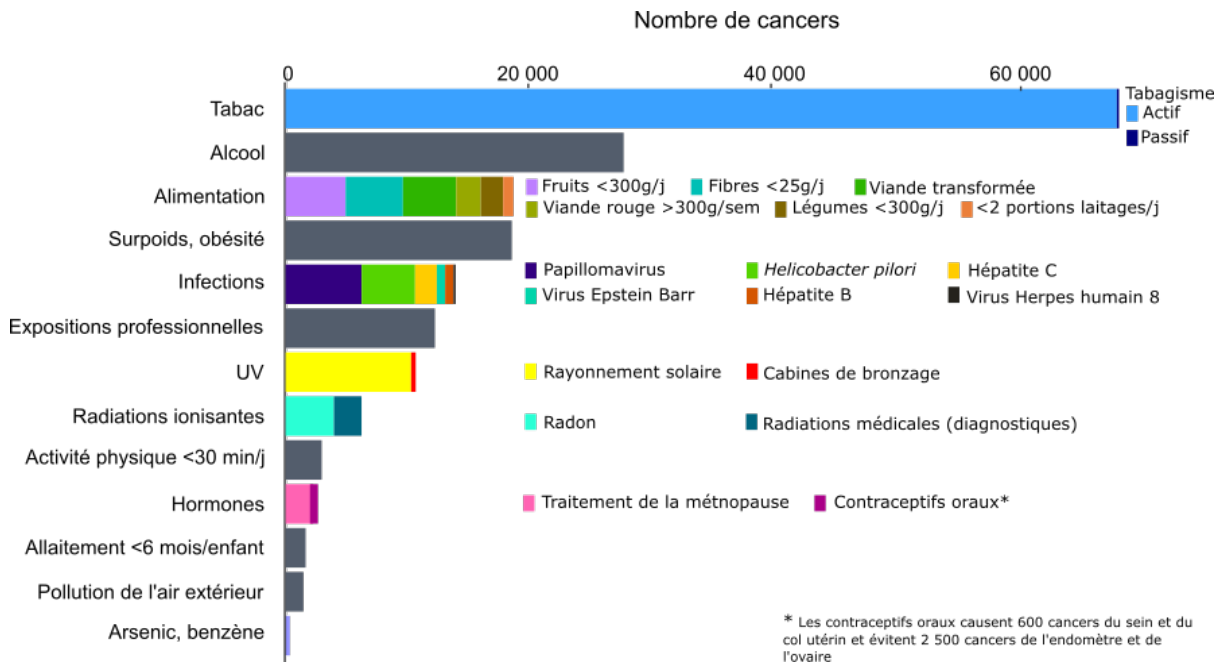


FIGURE 2 – [CIRC, 2018] Nouveaux cas de cancers attribuables au mode de vie et à l'environnement chez les adultes de plus de 30 ans en 2015.

Le CIRC rapporte que le tabac et l'alcool sont, à eux seuls, respectivement responsables de 20% et 8% des nouveaux cas. Il mentionne également que la France occupe la troisième place de l'OCDE pour la consommation d'alcool. De plus, les croyances semblent en décalage avec les données : en 2015, plus de deux tiers des français estiment que la pollution provoque plus de cancers que l'alcool [INCa, 2015], alors que moins de 1% des cas lui sont attribuables [CIRC, 2018]. Les cancers liés au tabac et à l'alcool possèdent, en outre, le pronostic le plus mauvais [Cowppli-Bony *et al.*, 2016], mettant en avant un besoin d'amélioration des traitements toujours présent à défaut d'une prévention efficace.

1.2.3 Traitements et taux de guérison

Les traitements pour le cancer sont nombreux et en constante évolution. Les modalités les plus utilisées sont la chimiothérapie, la chirurgie et la radiothérapie, mais la liste des traitements comprend également l'hormonothérapie, l'immunothérapie ainsi que les thérapies ciblées. Le choix du type de traitement dépend très largement du cas, en particulier du type de cancer, de son stade d'évolution et de l'emplacement des tumeurs. Généralement, plusieurs modalités sont utilisées en combinaison pour obtenir le meilleur compromis entre les chances de survie et les effets secondaires.

L'INCa estime qu'en 2017 en France, 1,2 millions de personnes ont été hospitalisées pour un cancer, ce qui représente un quart de l'activité hospitalière globale et une augmentation de 10 % par rapport à 2012 [INCa, 2019]. La chimiothérapie constitue 40,8 % de l'activité

en cancérologie, et la chirurgie 6,4 %. Toujours en 2017, 216 400 patients ont été traités par radiothérapie pour un total de plus de deux millions de séances².

Traitement par chirurgie

Le traitement par chirurgie consiste en une ablation de la tumeur et des tissus sains environnants, afin de ne laisser aucune cellule cancéreuse qui risquerait de causer une rechute. La possibilité de pratiquer la chirurgie dépend très largement de l'emplacement de la tumeur, de son étendue et de la présence de métastases. La chimiothérapie est généralement utilisée en complément, pour éliminer les potentielles cellules restantes et ainsi limiter le risque de rechute.

Traitement par chimiothérapie

La chimiothérapie se caractérise par l'injection de médicaments visant à freiner la propagation du cancer et à détruire les cellules tumorales, notamment en entravant la division cellulaire. Plusieurs dizaines de molécules différentes peuvent être utilisées, et les médicaments à disposition sont en constante évolution. Un traitement comprend généralement une à deux injections par mois pendant une durée moyenne de 6 mois.

Puisqu'elle touche l'ensemble du corps, son action n'est pas aussi localisée que la chirurgie et elle permet le traitement de tumeurs disséminées dans l'organisme. En revanche, puisqu'elle a une action sur toutes les cellules se multipliant rapidement, les effets secondaires peuvent être importants. En particulier, son effet sur la moelle osseuse peut entraîner la chute du taux de globules blancs et ainsi amoindrir la protection de l'organisme contre les infections.

Traitement par radiothérapie

Le traitement par radiothérapie est utilisé dans environ deux tiers des cas, et est caractérisé par l'utilisation de rayonnements ionisants pour détruire les cellules tumorales. Le principe et les différentes modalités de la radiothérapie sont décrits plus en détail à partir de la section 1.3.

Taux de survie

Le taux de survie dépend beaucoup de la localisation de la tumeur. En particulier, chez l'homme, la survie nette à 5 ans³ est la plus élevée (96 %) pour le cancer du testicule, et la plus faible (4 %) pour le mésothéliome pleural (une forme de cancer du poumon) [Defossez *et al.*, 2019]. Chez la femme, le taux de survie est compris entre 7 % pour le cancer du pancréas et 98 % pour la thyroïde. Globalement, le taux de survie diminue avec l'âge ; notamment à cause de la présence de comorbidités et d'un diagnostic réalisé souvent à un stade plus tardif de la maladie. À l'inverse, l'INCa rapporte un taux de survie à 5 ans pour les enfants s'élevant à 82 % [INCa, 2019].

2. Hors secteur privé libéral

3. Survie que l'on observe après 5 ans si la seule cause de décès était le cancer

Malgré l'augmentation importante du nombre de cas, le taux de mortalité dû au cancer est en baisse : en 2018 par rapport à 1990, il est plus faible de 1,8 % chez l'homme et de 0,8 % chez la femme [Defossez *et al.*, 2019], signe d'une probabilité de survie en hausse lorsqu'un cancer survient. Notamment, entre 1989 et 2005, le taux de guérison du cancer du sein est passé de 80 % à 87 %, celui du cancer de la prostate de 72 % à 94 %, celui du cancer colorectal de 54 % à 63 %, et celui du cancer du poumon de 13 % à 17 %. Cette baisse de la mortalité est expliquée par des diagnostics de plus en plus précoces grâce au dépistage, mais également grâce aux progrès réalisés dans les méthodes de traitement. On constate, toutefois, que 63,5% des patients traités souffrent de séquelles dues directement au cancer ou au traitement [INCa, 2019].

1.3 Principe de la radiothérapie

Les débuts de la radiothérapie remontent à la toute fin du XIXème siècle, peu après la découverte de la radioactivité et des dommages qu'elle peut causer sur les tissus organiques, et avant même de connaître précisément les mécanismes en jeu. D'abord limitée à l'utilisation du radium et des rayonnements de basse énergie (de l'ordre du keV) [Gérard *et al.*, 2010], la radiothérapie représentait pendant de nombreuses années un compromis plutôt inefficace entre les résultats obtenus et les effets secondaires [Lederman, 1981]. Elle s'est ensuite étendue à l'utilisation de nouveaux isotopes radioactifs et à de nouveaux types de rayonnements, puis, avec l'amélioration progressive de la compréhension de leur effet sur le corps, le rapport entre son bénéfice et ses risques s'est considérablement amélioré.

1.3.1 Émission de rayonnements en radiothérapie externe

Depuis la fin des années 1940, pour la radiothérapie «interne» ou curiethérapie (qui n'est pas traitée ici), les radiations utilisées en radiothérapie sont principalement émises par des sources radioactives placées directement au contact de la tumeur. La radiothérapie dite «externe», quant à elle, utilise un faisceau de particules produit à l'extérieur du patient, et les radiations sont généralement émises par un accélérateur linéaire («*linear accelerator*», qui donne l'appellation courante *linac*), dont un exemple est présenté ci-après en figure 3. Certains types de traitements externes ont également recours à des sources radioactives.

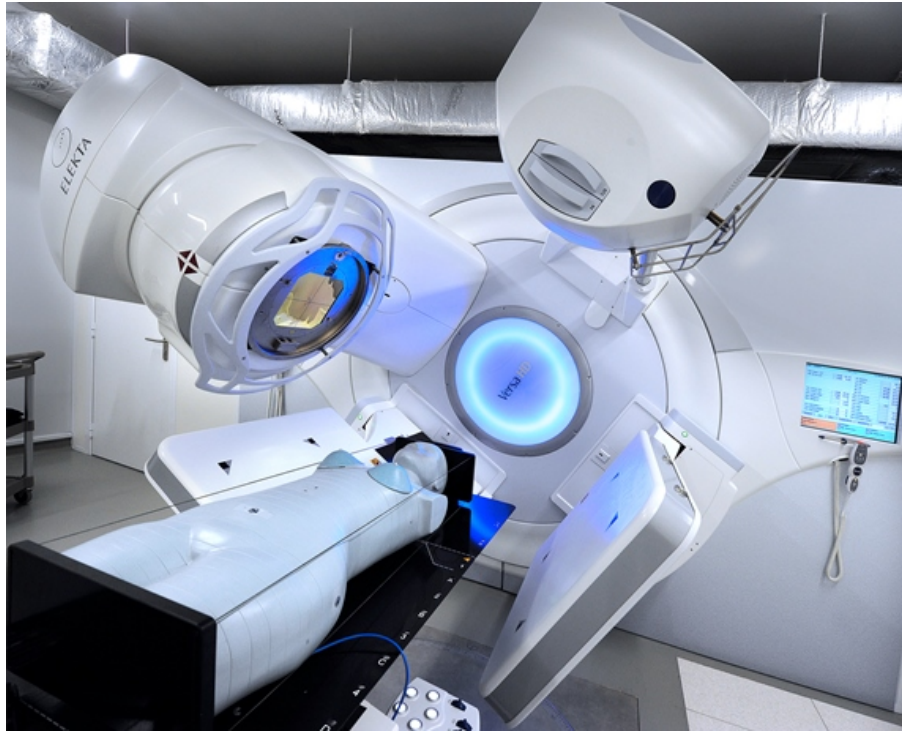


FIGURE 3 – Un linac médical Elekta Versa HD™ utilisé pour la recherche sur la plateforme DOSEO du centre CEA de Saclay. Un fantôme anthropomorphe, à l'intérieur duquel des détecteurs sont insérés, est ici placé sur la table de traitement pour simuler un patient.

La figure 4 ci-après donne une schématisation du bras d'un accélérateur linéaire médical standard et de ses différents constituants.

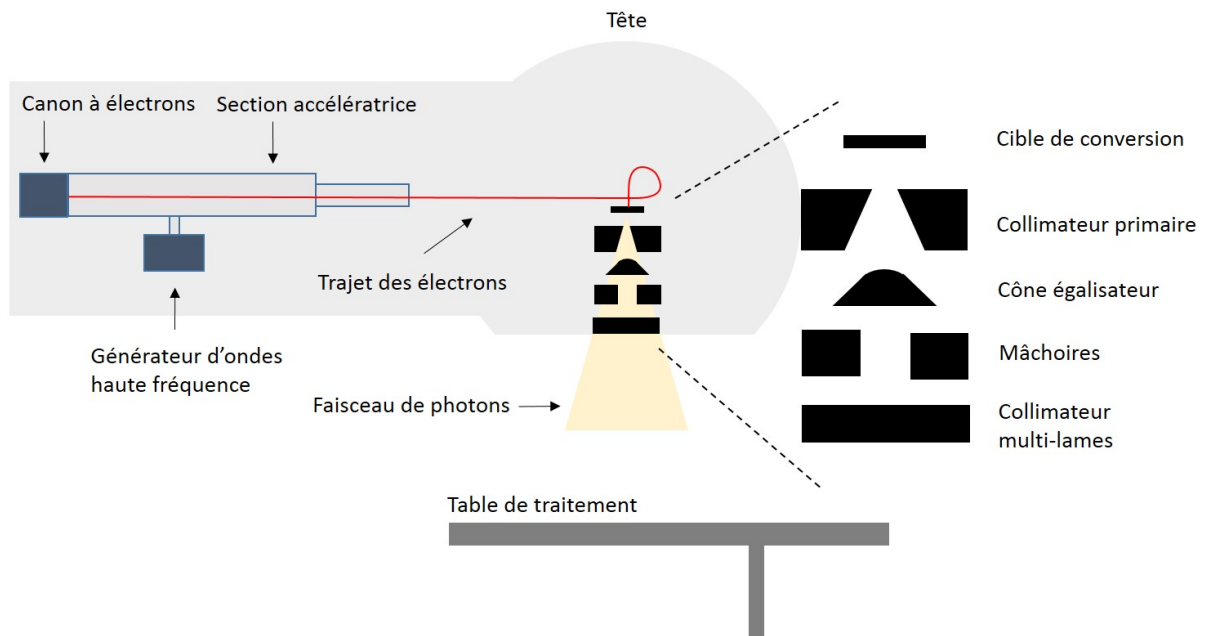


FIGURE 4 – Représentation schématisée du bras d'un accélérateur linéaire médical.

Un accélérateur est composé d'un canon à électrons, dans lequel un filament conducteur

(généralement de tungstène) est soumis à un courant électrique élevé pour en extraire ses électrons par effet thermoïonique. Ceux-ci passent ensuite dans une section accélératrice, dans lequel ils sont accélérés à l'aide d'un champ électromagnétique, lui-même créé par un klystron ou un magnétron. Ces électrons de haute énergie sont ensuite conduits jusqu'à la tête de l'accélérateur, avant d'être dirigés vers sa sortie qui fait face à la région à traiter. Ils peuvent être utilisés directement pour un traitement à faible profondeur, mais ils sont généralement convertis en photons dans une cible de conversion placée sur leur trajet.

Les photons utilisés pour le traitement sont le résultat de l'émission par rayonnement de freinage (ou bremsstrahlung) lors de l'impact des électrons sur la cible. Conventionnellement, les électrons sont accélérés à l'aide d'une tension comprise entre 6 et 20 MV; ces tensions correspondent ainsi à des énergies maximales pour les photons émis par l'accélérateur de 6 à 20 MeV (leur énergie moyenne étant plus faible). Ils sont également émis dans toutes les directions, et leur utilisation nécessite donc une collimation importante pour former un faisceau de traitement. Avant de sortir de la tête, ils rencontrent un premier collimateur qui débute la mise en forme du faisceau, d'intensité alors plus importante au centre que sur les bords. Cette hétérogénéité spatiale peut éventuellement être corrigée par le cône égalisateur (ou «Flattening Filter»), et une chambre d'ionisation est placée en aval du cône pour contrôler le faisceau. Finalement, une seconde collimation plus fine peut être réalisée à l'aide des mâchoires, qui donnent une forme carrée au champ d'irradiation, et du collimateur multi-lames («Multileaf Collimator» ou MLC, représenté sur la figure 5) qui adapte précisément la forme du faisceau à la région que l'on souhaite irradier.

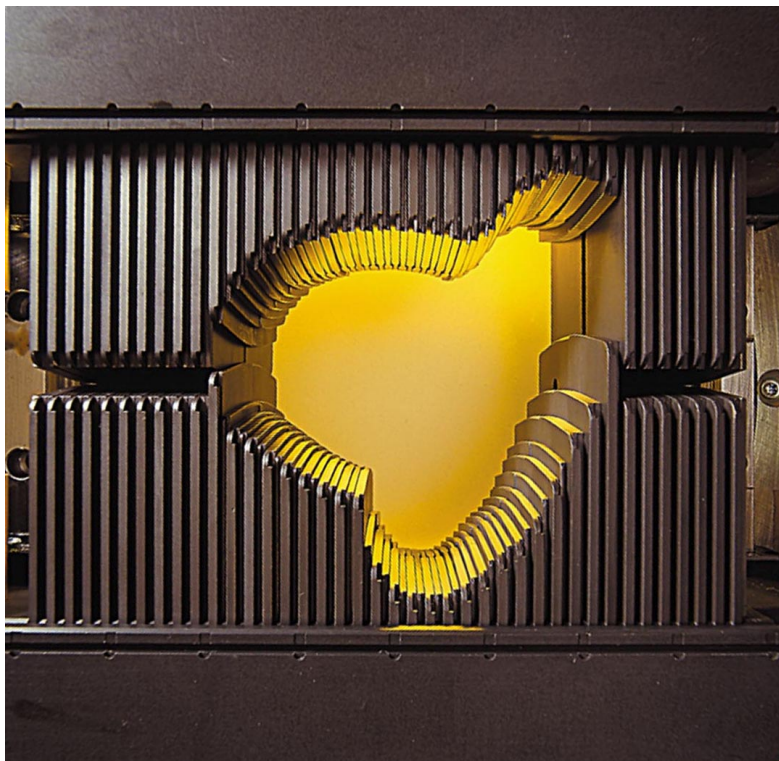


FIGURE 5 – [Cazoulat, 2013] Un collimateur multilame. Indispensable à la conformation du faisceau à la région à traiter, il équipe aujourd'hui la majorité des accélérateurs médicaux utilisés en radiothérapie.

Chaque lame du MLC est capable de se déplacer de manière indépendante, permettant une grande diversité dans les formes possibles pour le faisceau.

1.3.2 Destruction des cellules par ionisation

Les électrons et les photons émis par un linac sont suffisamment énergétiques pour être ionisants, c'est-à-dire capables d'arracher des électrons aux atomes du milieu qu'ils rencontrent par leurs interactions avec celui-ci. Cette propriété permet le traitement des tumeurs via les dommages causés notamment à l'ADN de leurs cellules.

Ces dommages peuvent être produits de deux manières. Il est possible que l'ADN d'une cellule subisse une lésion en étant directement touché par une particule ionisante, mais la principale source de dommages à l'ADN est la radiolyse de l'eau contenue dans les cellules. Sous l'effet des particules ionisantes, l'eau est décomposée en radicaux libres $H^\bullet + OH^\bullet$, qui vont à leur tour réagir avec l'ADN et l'endommager de manière indirecte.

La cellule possède naturellement des mécanismes de réparation de l'ADN lorsque celui-ci est endommagé. Toutefois, si le nombre de lésions est trop important ou si le système de réparation est lui-même perturbé, elle peut déclencher sa propre mort (apoptose) et être éliminée par le système immunitaire. Le but de la radiothérapie est donc, via des lésions de l'ADN, de détruire les cellules tumorales afin de freiner la propagation du cancer, et, si possible, d'éliminer totalement les cellules malignes pour permettre une rémission. En radiothérapie, la grandeur utilisée pour caractériser la quantité d'irradiation délivrée est la dose, généralement exprimée en gray (équivalent à des joules par kilogramme), qui représente ainsi l'énergie déposée dans la matière par unité de masse, et est donc liée à la quantité de dommages causés aux tissus. De même dimension, le sievert (Sv) représente une dose pondérée par un facteur de sensibilité propre à chaque organe et par un facteur lié au type de rayonnement, et informe davantage sur l'effet biologique des rayonnements. Le gray est une unité physique mesurable et le sievert une unité calculée.

Plus cette dose est importante, plus la tumeur est endommagée et la guérison est probable. Toutefois, malgré la collimation du faisceau, des tissus sains sont inévitablement touchés, en particulier sur son passage en amont et en aval de la zone tumorale. L'effet des rayonnements sur les cellules saines étant similaire à celui produit sur les cellules tumorales, les tissus sains peuvent être endommagés par l'irradiation et subir des effets secondaires importants (voir en section 1.4 leur est consacrée). Un mécanisme joue toutefois en faveur de la radiothérapie : les cellules tumorales sont moins performantes que les cellules saines pour réparer les dommages de leur ADN. Ainsi, en répétant le processus d'irradiation après avoir laissé s'écouler un certain temps pour laisser les cellules saines se réparer (on parle de «fractionnement» du traitement), une différence se crée entre les populations de cellules saines et cancéreuses. Ce processus est illustré ci-dessous sur la figure 6.

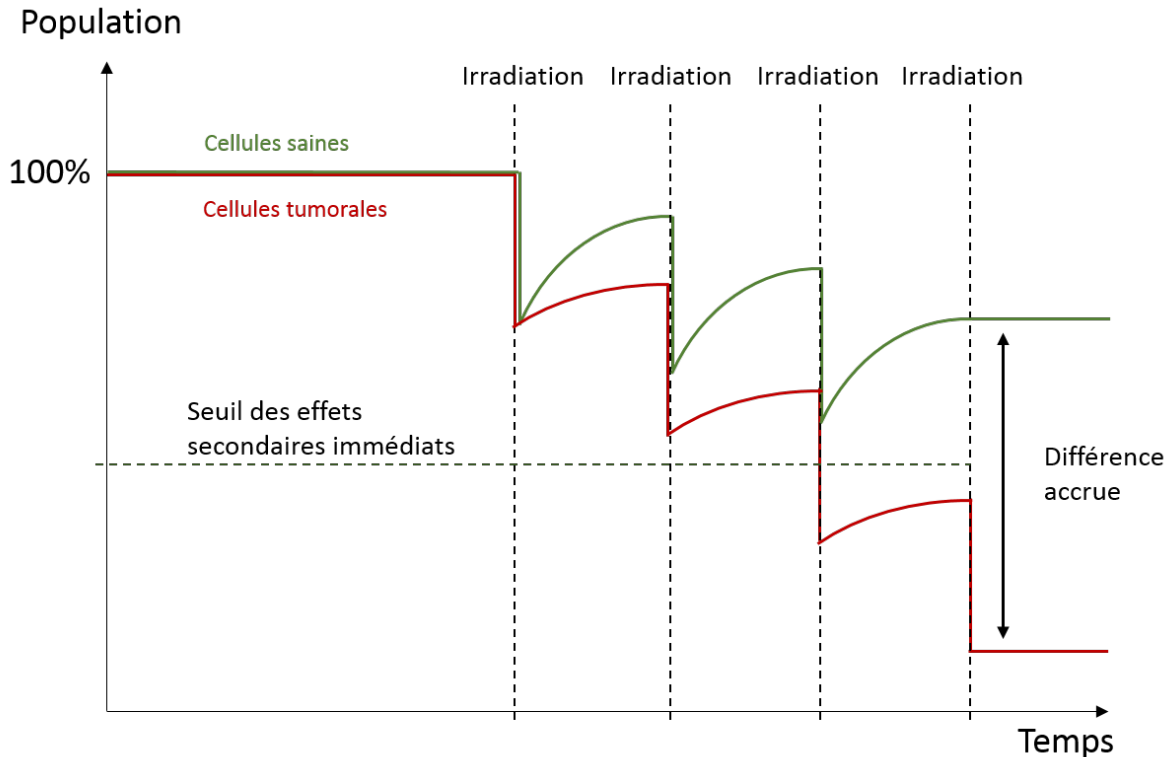


FIGURE 6 – Illustration du principe du fractionnement, en supposant qu’une proportion égale des cellules saines et tumorales d’origine sont détruites à chaque irradiation. La réparation des cellules saines étant plus performante, une différence se crée petit à petit entre les deux populations de cellules lorsque l’irradiation est délivrée par fractions.

La bonne régulation des populations cellulaires, par un dosage contrôlé des rayonnements délivrés et des intervalles de temps entre les séances d’irradiation, permet de détruire les cellules tumorales tout en préservant au maximum les cellules saines, limitant ainsi la dégradation des organes voisins. Un traitement en radiothérapie est ainsi généralement réparti sur plusieurs séances (de quelques unes à plusieurs dizaines), entrecoupées par un temps de repos durant lequel les cellules se réparent.

Malgré cela, il reste essentiel d’éviter autant que possible l’irradiation des organes sains. Un enjeu majeur de la radiothérapie est donc d’obtenir le meilleur compromis possible entre l’irradiation de la tumeur, qui doit être suffisante pour la détruire entièrement, et l’irradiation des tissus sains avoisinants qui doit rester minimale. L’amélioration de ce compromis nécessite un ciblage précis de la tumeur, et fait l’objet de nombreuses avancées technologiques. Notamment, de multiples techniques, dont quelques exemples sont décrits dans la section suivante, ont été développées pour permettre une irradiation de plus en plus précise.

1.3.3 Techniques de radiothérapie

Radiothérapie conformationnelle 3D

La radiothérapie conformationnelle 3D ou RC3D est aujourd’hui la technique

conventionnelle en radiothérapie, et forme la base des techniques plus avancées. Elle s'appuie sur des images en trois dimensions du patient, et en particulier de la région à traiter, obtenues par imagerie tomodensitométrique (scanner), qui est l'image de référence pour le calcul de dose, ou bien par imagerie par résonance magnétique (IRM) ou tomographie par émission de positons (TEP ou SPECT). Ces images permettent le contournage précis des tumeurs et des organes à risque, puis la simulation informatique du dépôt de dose dans le patient, et rend ainsi possible une planification des doses délivrées. En France, elle se développe particulièrement à partir des années 1990, lorsque les progrès en imagerie permettent de mieux visualiser les régions à traiter.

Lors d'un traitement en RC3D, plusieurs faisceaux fixes viennent irradier tour à tour la tumeur selon différents angles d'incidence grâce à la rotation du bras de l'accélérateur, après une éventuelle modification de la forme du champ par le MLC. Avant l'introduction des collimateurs multilames, la RC3D se faisait grâce à des champs carrés simplement modulés par des masques de plomb personnalisés ; on parle dans ce cas de radiothérapie standard.

La radiothérapie conformationnelle 3D a donné par la suite naissance à de nombreuses techniques plus avancées, qui viennent généralement rajouter de nouvelles fonctionnalités au traitement pour obtenir une meilleure personnalisation de la dose et permettre l'irradiation de volumes plus complexes.

Radiothérapie conformationnelle avec modulation d'intensité (RCMI)

La radiothérapie conformationnelle avec modulation d'intensité (RCMI) est caractérisée par une meilleure conformation à la tumeur (concavités, etc.) grâce aux formes de champ permises par le MLC et également par des variations du débit de dose pendant l'irradiation. L'INCa estime qu'en 2017, 98% des centres de radiothérapie français sont équipés pour effectuer des traitements en RCMI, qui est en passe de devenir le nouveau traitement standard.

Par rapport à la RC3D, cette technique permet d'obtenir un gradient de dose plus important entre la région à traiter et les organes avoisinants, permettant de délivrer une dose plus importante à la tumeur sans augmenter les effets secondaires, et ainsi d'obtenir un taux d'effets secondaires plus faible. Elle permet également de traiter des tumeurs de formes concaves, par exemple entourant un organe sensible [Galvin *et al.*, 2004].

On distingue deux principaux modes de RCMI, lors desquels le bras reste fixe : en «Step and Shoot», le mouvement des lames du MLC se fait entre chaque irradiation, tandis qu'en «Sliding Window», le mouvement se fait au cours de l'irradiation. La figure 7, ci-dessous, compare les distributions de dose obtenues pour une planification lors d'un traitement de la prostate, pour la radiothérapie standard, la RC3D et la RCMI.

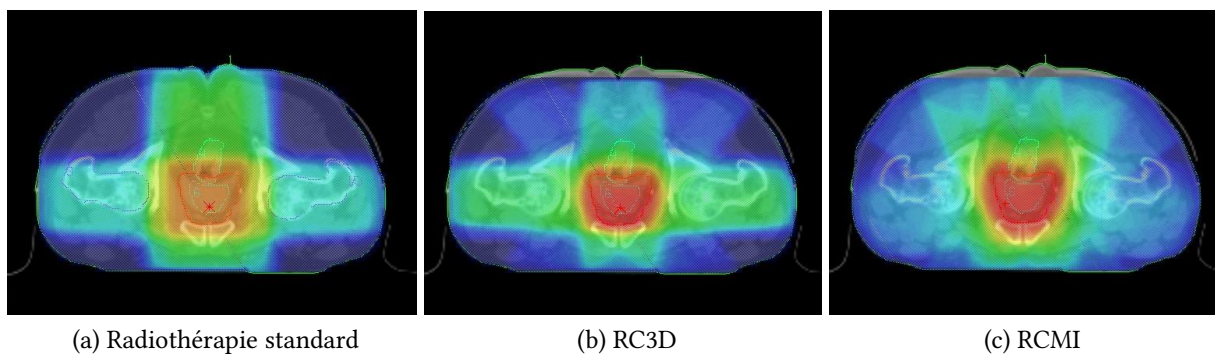


FIGURE 7 – Exemple de distribution de dose obtenue pour un traitement de la prostate pour la radiothérapie standard (a), la RC3D (b) et la RCMi (c). La couleur indique un pourcentage de la dose prescrite à la tumeur, la zone cible étant contournée en rouge [Colnot, 2019].

Cet exemple met en évidence une conformation de la dose à la tumeur plus importante dans le cas de la RCMi qu'en RC3D, elle-même meilleure qu'en radiothérapie standard. On constate également que le nombre de faisceaux est bien plus élevé, ce qui est généralement une caractéristique de la RCMi.

Arcthérapie volumétrique (VMAT)



FIGURE 8 – Illustration du principe du traitement par VMAT, dans lequel le bras de l'accélérateur tourne autour du patient durant l'irradiation. (source : www.itnonline.com/content/elektas-infinity-delivers-vmat)

L'arcthérapie volumétrique par modulation d'intensité («Volumetric Modulated Arc Therapy» ou VMAT [Teoh *et al.*, 2011]) introduit une rotation continue du bras de l'accélérateur, qui forme des arcs durant l'irradiation. Ce faisceau en rotation remplace l'utilisation de faisceaux fixes, mais l'arcthérapie peut tout de même se pratiquer à l'aide d'accélérateurs conventionnels. Ce type de traitement permet une meilleure

conformation de la dose qu'en RCMI, mais réduit surtout le temps nécessaire au traitement [Bertelsen *et al.*, 2010].

Tomothérapie



FIGURE 9 – Représentation d'un appareil de tomothérapie. La modalité associe une rotation du faisceau et une translation de la table de traitement. (source : www.pvhomed.com/treatment/tomotherapy)

La tomothérapie utilise la rotation de l'accélérateur sur 360° combinée à un déplacement continu de la table de traitement. Le traitement est réalisé par coupes successives, à la façon d'un scanner, à l'aide d'un faisceau fin en forme d'éventail lui aussi modulé en intensité. Ce type de traitement permet de coupler l'irradiation à l'imagerie du patient, qui permet de contrôler le bon positionnement de la tumeur au cours du traitement. La tomothérapie relève donc des techniques dites d'irradiation guidée par l'imagerie («Image Guided Radiation Therapy» ou IGRT). L'efficacité et la durée du traitement sont comparables à la RCMI, mais la tomothérapie permet de délivrer une dose plus homogène à la zone tumorale [Oliver *et al.*, 2009].

Stéréotaxie



FIGURE 10 – Un appareil de stéréotaxie de type CyberKnife[®], sur lequel un accélérateur linéaire miniaturisé est monté sur un bras robotisé. (source : www.deutsches-cyberknife-zentrum.de/en/cyberknife)

Aussi appelée radiochirurgie, la stéréotaxie est basée sur l'utilisation de microfaisceaux, délivrant une très haute dose sur de petits volumes [De Salles *et al.*, 2008]. Elle est généralement utilisée pour traiter les tumeurs de petite taille, notamment cérébrales, avec un traitement de type hypofractionné (peu de fractions, mais une dose élevée à chaque irradiation) voire en une seule fraction.

Cette technique, pour laquelle l'erreur permise sur le positionnement est extrêmement limitée, a été rendue possible par l'amélioration de l'imagerie réalisée au cours du traitement, qui permet un ciblage très précis de la tumeur en temps réel, avec une précision pouvant atteindre le millimètre. L'INCa rapporte que la proportion de centres de radiothérapie pratiquant des irradiations en conditions stéréotaxiques a plus que doublé depuis 2012, pour atteindre 45% en 2017.

Autres types de radiothérapie

Les techniques présentées ci-dessus représentent aujourd'hui la majorité des traitements en radiothérapie externe. D'autres procédés peuvent toutefois venir s'ajouter en complément aux techniques existantes. Notamment, l'asservissement à la respiration vise à prendre en compte les mouvements respiratoires du patient, qui peuvent entraîner un décalage temporaire de la position de la tumeur et éventuellement dégrader la conformation de la dose à la région à traiter. Plusieurs méthodes existent pour y remédier : il est possible de demander au patient de bloquer sa respiration le temps d'une irradiation courte, d'irradier de manière périodique (seulement lorsque la tumeur est bien positionnée), ou bien de la suivre au cours de son mouvement à l'aide de l'imagerie. L'INCa indique que ce type de techniques est utilisé dans 32% des centres de radiothérapie.

De nombreuses méthodes d'imagerie peuvent être utilisées durant le traitement, formant l'ensemble des méthodes d'IGRT. L'imagerie portale, en particulier, réalise une image du faisceau de traitement. Elle permet d'évaluer l'accord avec l'image attendue par la

planification, et ainsi de contrôler le bon déroulement du traitement. D'après l'INCa, en 2017, ce type d'imagerie équipe 91% des centres de radiothérapie.

Finalement, l'irradiation par des ions, appelée hadronthérapie, est actuellement un objet de recherche important [Jäkel, 2007]. En particulier, les protons sont utilisés pour certains traitements de l'oeil et de la base du crâne. Grâce à leur dépôt d'énergie très localisé (à la fin de leur parcours), ils permettent d'épargner très largement les tissus sains situés derrière la tumeur, et de limiter le dépôt de dose aux tissus situés sur leur passage. En 2014, elle représente 1% des patients traités par radiothérapie [INCa, 2016]. Actuellement en développement, l'utilisation des ions carbone est également une possibilité pour la hadronthérapie.

1.3.4 Étapes d'un traitement

Quelle que soit la technique utilisée pour le traitement, celui-ci se déroule de manière similaire. Après le diagnostic, lorsque la décision a été prise de traiter le patient par radiothérapie, la première étape consiste à réaliser l'imagerie 3D du patient qui sera utilisée pour la planification des doses délivrées. Elle est effectuée par scanner, auquel peuvent venir s'ajouter d'autres modes d'imagerie (IRM, TEP) en combinaison pour localiser au mieux la tumeur et les organes voisins. L'imagerie permet de déterminer les propriétés physiques des tissus du patient, ce qui la rend essentielle pour créer un modèle informatique du patient. On inclut ensuite dans ce modèle la délimitation de la zone à traiter et des organes à risque qui doivent être épargnés, puis il est utilisé par le système de planification de traitement (généralement appelé TPS pour «Treatment Planning System»).

Le TPS est un logiciel qui détermine le plan de traitement, c'est-à-dire l'ensemble des séquences d'irradiation délivrées durant une séance : temps et intensité d'irradiation, mouvement du MLC, rotation du bras de l'accélérateur... Cette optimisation est réalisée à partir des données du patient et des contraintes thérapeutiques imposées, et vise à respecter la dose prescrite pour le volume cible tout en minimisant l'irradiation des tissus sains. Dans le cas de la RCMI, elle est réalisée par planification inverse : la distribution de dose souhaitée est indiquée au logiciel, qui calcule le plan de traitement adapté pour l'obtenir [Taylor and Powell, 2004]. Ce dernier est obtenu de manière itérative : le TPS utilise un ensemble de paramètres initiaux, puis calcule la distribution de dose obtenue. En fonction du résultat, il modifie légèrement les paramètres utilisés, puis calcule à nouveau la distribution de dose, et ainsi de suite jusqu'à obtenir un plan de traitement satisfaisant. Avant et au cours du traitement, d'autres contrôles sont réalisés (notamment grâce à l'imagerie) pour s'assurer que la planification est bien suivie.

Toutefois, malgré l'optimisation de la planification, la dose délivrée aux tissus sains n'est jamais nulle et des effets secondaires indésirables peuvent apparaître. De plus, la dose déposée hors du champ de traitement, appelée dose hors-champ ou dose périphérique, n'est pas incluse dans l'optimisation par les TPS à cause de la difficulté de son estimation, et reste inconnue dans la plupart des cas. La dose hors-champ et ses effets fait l'objet du prochain chapitre ; avant cela, la section suivante décrit de manière générale les différents effets secondaires de la radiothérapie ainsi que leur origine.

1.4 Effets secondaires des rayonnements ionisants

1.4.1 Généralités

Nous avons vu en 1.3 que lors d'un traitement par radiothérapie, des lésions sont inévitablement causées aux tissus sains. Bien que l'irradiation elle-même ne soit pas douloureuse, ces dommages peuvent entraîner deux types d'effets indésirables, que l'on classe en «effets déterministes», qui peuvent apparaître à court ou long terme, et «effets stochastiques» qui apparaissent généralement longtemps après le traitement. Ci-dessous, la figure 11 résume les différentes causes de ces effets secondaires.

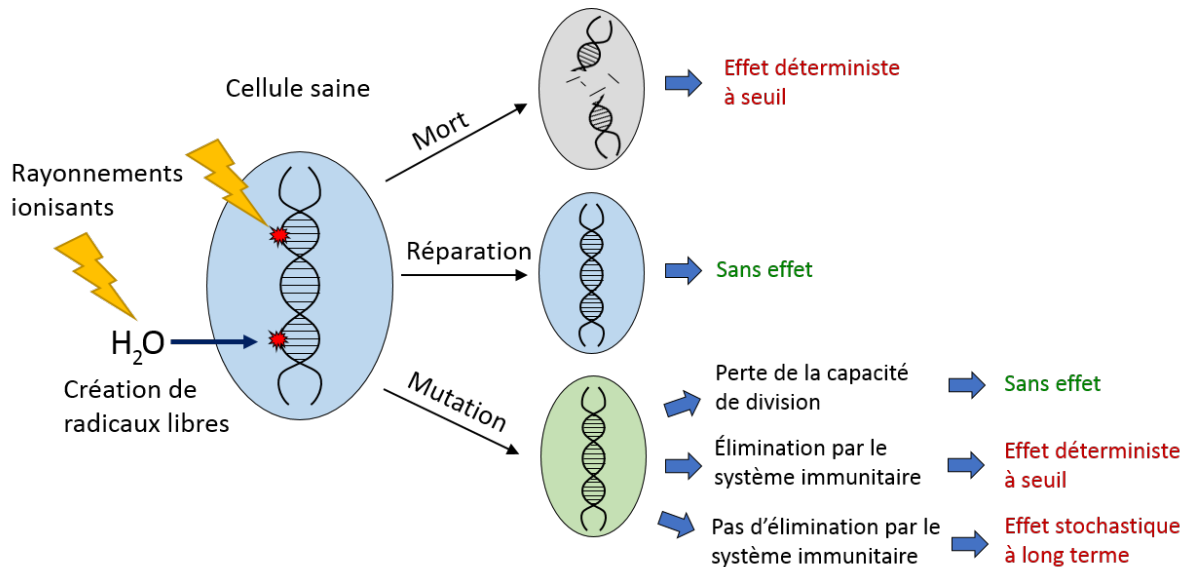


FIGURE 11 – Diagramme représentant l'effet des rayonnements ionisants sur l'organisme selon le devenir de la cellule touchée.

Les effets déterministes sont liés à la dégradation des tissus sains causée par les rayonnements ionisants, via la destruction de leurs cellules. La mort d'une cellule peut être due à un trop grand endommagement de son ADN ou de ses organites critiques, ou bien à une mutation qui déclenche l'élimination de la cellule par le système immunitaire. Selon le type de tissu touché, ces effets peuvent être précoces et apparaître au cours des semaines suivant le traitement, ou tardifs et survenir des mois, voire des années plus tard. Ces effets secondaires sont extrêmement variés, puisqu'ils dépendent fortement de l'organe touché. Parmi eux, on peut notamment citer les brûlures et irritations cutanées, les nausées et les vomissements lorsque la région de l'estomac est touchée [Lee *et al.*, 2012], l'anémie [Harrison *et al.*, 2001] lorsque la moëlle osseuse est irradiée (et plus généralement la baisse du nombre de cellules sanguines), et une fatigue générale, surtout si la région traitée est étendue. Tous ces effets possèdent toutefois des caractéristiques communes : ils apparaissent toujours à partir d'un seuil en dose, spécifique à chaque effet, et leur gravité est directement liée à la dose reçue, ce qui les rend prévisibles. Ils sont, de plus, généralement réversibles et, bien qu'inconfortables, disparaissent quelques semaines après le traitement. Ce sont ces effets que la planification du traitement et le fractionnement ont pour but de réduire au minimum, en maintenant autant que possible la dose délivrée en dessous de leur seuil d'apparition.

L'apparition des effets stochastiques, en revanche, est entièrement aléatoire. Lorsque des dommages sont causés à l'ADN des cellules saines par des particules ionisantes, des mutations aléatoires du code génétique peuvent apparaître suite à des erreurs de réparation. Celles-ci s'ajoutent à d'autres mutations déjà présentes et peuvent causer des complications génétiques. Notamment, nous avons vu en 1.2.2 que l'accumulation de mutations aléatoires est un facteur clé dans l'apparition d'un cancer ; c'est pour cette raison que l'exposition aux rayonnements ionisants se trouve parmi les facteurs de risques pour cette maladie, et que, paradoxalement, l'apparition d'un second cancer figure parmi les effets secondaires de la radiothérapie.

De manière générale, plus l'exposition aux rayonnements ionisants est élevée, plus la probabilité de développer des complications de type stochastique est grande. Contrairement aux effets déterministes, ceux-ci ne sont pas prévisibles au niveau d'un individu et leur gravité ne dépend pas de la dose reçue ; seule leur probabilité d'apparition peut être estimée. De plus, puisqu'ils sont causés par une accumulation de mutations, ils sont généralement tardifs et se manifestent presque toujours de nombreuses années après la fin du traitement.

1.4.2 Effets secondaires stochastiques

Cancer secondaire

Un cancer est dit radio-induit s'il est causé directement par une exposition aux rayonnements ionisants ; si un patient traité par radiothérapie développe un nouveau cancer à la suite de son irradiation, on parle alors de second cancer. Bien que le lien entre l'irradiation et l'apparition de mutations génétiques soit connu depuis le début du XX^{ème} siècle [Muller, 1927], à cause de la nature aléatoire du cancer, il est toujours délicat de déterminer sans ambiguïté si une tumeur est due ou non à une irradiation. Les premiers critères permettant d'établir le diagnostic ont été donnés par Cahan et al. en 1948, dans une étude visant à étudier l'apparition d'un sarcome osseux suite à l'irradiation de patients pour des maladies osseuses de type non-cancéreuses [Cahan *et al.*, 1948]. Ces critères ont par la suite été modifiés, notamment par Arlen et al. [Arlen *et al.*, 1971], et on considère aujourd'hui qu'une tumeur peut être classifiée en second cancer si :

- La nature de la tumeur a été vérifiée via son histologie,
- Lorsque l'irradiation a été effectuée, le patient ne présentait pas de tumeur maligne de même histologie,
- Le cancer s'est développé dans la région couverte par le champ de traitement ou en périphérie,
- Plusieurs années se sont écoulées entre l'irradiation et son apparition. Cette condition assure qu'il ne s'agit pas d'un autre cancer déjà en développement au moment de l'irradiation,
- Le patient ne présente pas de prédisposition à ce type de cancer.

Malgré la diminution toujours plus importante des doses délivrées aux tissus sains, il est aujourd'hui admis que l'apparition d'un second cancer relève des risques inhérents à la radiothérapie et les études attestant de ce risque sont très nombreuses. En particulier ces dernières années, à cause de l'augmentation du taux de survie des patients, de leur espérance de vie et de la durée de leur suivi, il est possible d'observer un excès dans le nombre de cancers chez les patients traités par radiothérapie, avec une incidence pouvant aller jusqu'à

20% dans certains cas et un risque accru même plusieurs dizaines d'années après le traitement [Tubiana, 2009a, Brenner *et al.*, 2000, Brenner *et al.*, 2003, Chaturvedi *et al.*, 2007], et cela pour de nombreux types de cancers initiaux, dont le cancer cervical [Ohno *et al.*, 2006], des testicules [van Leeuwen *et al.*, 1993] ou du poumon [Salminen *et al.*, 1995].

Dans une étude visant à quantifier le risque de cancer du sein à la suite d'un traitement par radiothérapie pour des patientes atteintes de lymphome de Hodgkin, Travis *et al.* estiment qu'une irradiation à 4 Gy multiplie le risque de second cancer par 3,2, tandis qu'une irradiation à plus de 40 Gy multiplie le risque par 8 [Travis *et al.*, 2003]. Curtis *et al.*, à l'aide de la base de données du SEER (Surveillance, Epidemiology, and End Results) comprenant plus de deux millions de patients ayant survécu à un premier cancer, estiment que le risque de second cancer pour cette population est supérieur de 14% par rapport à la population générale, avec un risque 2 à 3 fois plus élevé chez les jeunes adultes [Curtis *et al.*, 2006].

La majorité des études s'accordent sur la nécessité de prendre en compte ce risque pour réduire l'incidence des seconds cancers [Tubiana, 2009a]. Il peut même, en particulier pour les cancers pédiatriques, contrebalancer l'apport des techniques modernes sur le taux de survie à long terme. De nombreuses études indiquent, en effet, que les enfants sont considérablement plus vulnérables à l'effet carcinogène de la radiothérapie [Madan, 2018, Cosset *et al.*, 2018, de Vathaire *et al.*, 1999, National Research Council, 2006], avec un risque pouvant être 3 à 6 fois plus élevé que pour les adultes [Hall, 2020, Curtis *et al.*, 2006], et une probabilité comprise entre 10 et 30% d'avoir un second cancer dans les 30 ans suivant le traitement [Smith *et al.*, 2010]. Notamment, Tubiana *et al.* rapportent que chez les enfants, une dose de 100 mGy est déjà suffisante pour augmenter significativement le risque de cancer du sein et de la thyroïde [Tubiana, 2009a].

Les seconds cancers sont le plus souvent observés pour les doses supérieures à 2 Gy, et leur incidence augmente avec la dose [Tubiana, 2009a, Diallo *et al.*, 2009, Chargari and Cosset, 2013]. En revanche, l'augmentation du risque est également visible pour des doses beaucoup plus faibles, allant de 50 à 100 mSv [Brenner *et al.*, 2003], ce qui interroge sur la relation entre la dose et les effets secondaires, toujours à l'origine d'importants débats à l'heure actuelle et sujet de la section suivante.

Autres effets

Bien que plus rares, les problèmes cardiaques figurent, après les cancers secondaires, parmi les principales causes de mortalité induite par un traitement par radiothérapie [Castellino *et al.*, 2010, Weintraub *et al.*, 2010]. De nombreux auteurs s'intéressent au suivi à long terme des patients, et mettent en évidence une augmentation du risque de problèmes cardiovasculaires bien plus importante lorsque le traitement s'est déroulé durant l'enfance [Mertens *et al.*, 2001, Möller *et al.*, 2001, Green *et al.*, 1999]. Les équipes de Tukenova et Guldner indiquent que le risque augmente de manière linéaire avec la dose reçue par le cœur, et rapportent des augmentations respectives de 60 %/Gy [Tukenova *et al.*, 2010] et 26 %/Gy [Guldner *et al.*, 2006] qui, bien que différentes, signalent qu'un risque non négligeable de troubles cardiaques est lié à la radiothérapie. Les problèmes cardiaques apparaissent également plus fréquemment pour les traitements du cancer du sein, à cause de la dose reçue par le cœur, situé à proximité de la zone de traitement [Haddy *et al.*, 2016, Paszat *et al.*, 2007, Correa *et al.*, 2008]. Bouillon *et al.* indiquent, notamment, qu'un traitement du cancer du sein augmente de 76 % le risque de décès

dû à une pathologie cardiaque, et que ce risque est 56 % plus élevé pour un traitement du côté gauche par rapport à un traitement du côté droit [Bouillon *et al.*, 2011]. Enfin, Darby *et al.* estiment que le risque est accru de 7,4 % par gray délivré au cœur, sans seuil apparent [Darby *et al.*, 2013]. La majorité des pathologies cardiovasculaires apparaissant au moins 10 ans après le traitement, il peut toutefois être difficile de déterminer leurs causes exactes [Jurado *et al.*, 2008].

De nombreuses études mentionnent également un risque accru de cataractes lors des traitements oculaires [Ferrufino-Ponce and Henderson, 2006]. Dans une étude portant sur le suivi de patients traités pour un lymphome oculaire, Park *et al.* rapportent un risque 3,47 fois supérieur à la normale lorsque la dose au cristallin est supérieure à 30 Gy, et plus de 4 fois plus élevé lorsqu'aucune protection des yeux n'est utilisée au cours du traitement [Park *et al.*, 2017]. Pour un adulte, l'augmentation du risque est généralement visible à partir d'une dose au cristallin de 5 Gy ; pour les doses supérieures à 16,5 Gy, une déficience visuelle est presque toujours présente [Henk *et al.*, 1993]. Pour les enfants, ce risque est encore plus élevé : Hall *et al.* estiment que, pour le traitement d'un cancer pédiatrique, le risque de cataracte est augmenté de 50% par Gy au cristallin [Hall *et al.*, 1999].

Certaines études rapportent, de plus, l'apparition de diabète à la suite de traitements par radiothérapie, lié à la dose reçue par le pancréas. Kleinerman *et al.* rapportent un risque jusqu'à 3,79 fois plus élevé selon la dose reçue pendant les traitements étudiés, et précisent que l'effet des faibles doses est encore une fois incertain [Kleinerman *et al.*, 2010]. De Vathaire *et al.*, quant à eux, indiquent que le risque augmente avec la dose reçue et, à nouveau, que les enfants ont d'autant plus de risques de développer cette complication, puisque son incidence est 8 fois plus élevée pour les patients ayant moins de deux ans au moment du traitement [de Vathaire *et al.*, 2012].

Enfin, l'irradiation du fœtus lors du traitement de femmes enceintes est liée à un risque de mort, de retard de croissance, de malformations, de stérilité, de cancer et, plus généralement, d'erreurs génétiques à partir de 10 cGy [Stovall, 1995].

1.4.3 Relation dose-effets

La connaissance de la relation entre la dose reçue et le risque de second cancer provient à l'origine des études épidémiologiques réalisées sur les survivants des bombes atomiques de Hiroshima et Nagasaki. Ces données sont essentielles pour la compréhension de l'effet des faibles doses : elles concernent une cohorte considérable (plusieurs dizaines de milliers de personnes), ayant eu un suivi complet et étendu dans le temps ; les survivants ont, de plus, été exposés à des doses très variées et connues relativement précisément. Notamment, la moitié d'entre eux (soit 26300 personnes) ont reçu des doses inférieures à 50 mSv [Preston *et al.*, 2003].

Ces données ont permis d'établir la linéarité, aujourd'hui admise par la majorité des études, du risque de cancer radio-induit avec la dose reçue entre 100 mSv et 2 Sv : le risque augmente approximativement de 5% par sievert [National Research Council, 2006]. À l'heure actuelle, il n'y a cependant aucun consensus pour les doses inférieures, et les résultats des études divergent. Différents modèles ont été élaborés, à la fois à partir d'études épidémiologiques et de la connaissance des mécanismes biologiques en jeu lors d'une irradiation. La figure 12 ci-dessous présente les principales possibilités étudiées pour la relation dose-effet en dessous

de 100 mSv.

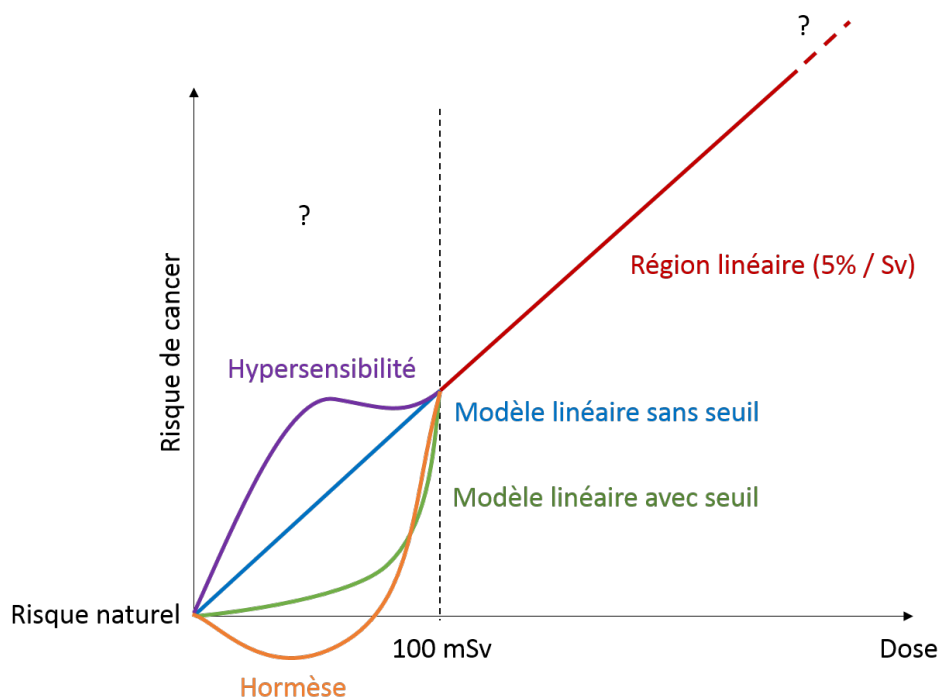


FIGURE 12 – Illustration des différentes modélisations possibles pour la relation entre la dose et le risque de cancer radio-induit.

Brenner et al. suggèrent qu'un modèle linéaire sans seuil semble être le plus adapté pour extrapoler le risque à des doses inférieures à 100 mSv [Brenner *et al.*, 2003]. Ce modèle est aujourd'hui le plus adopté, en particulier dans les applications de radioprotection où les faibles doses sont généralement rencontrées, et suggère que, puisque le cancer résulte d'une accumulation de mutations et que toute particule ionisante est susceptible de causer une telle mutation, alors la probabilité d'apparition d'un cancer est proportionnelle à la dose, aussi faible soit-elle.

Toutefois, d'autres études évaluent un risque bien moindre et semblent préconiser un modèle linéaire avec seuil, pour lequel une irradiation n'aurait que très peu d'effet en dessous d'une certaine dose. D'autres encore estiment que les faibles doses pourraient stimuler le système de réparation de l'ADN par hormèse⁴ et auraient donc un effet protecteur, réduisant même le risque de cancer par rapport à son niveau naturel [Feinendegen, 2005]. À l'inverse, Hall et al. mettent en évidence une hypersensibilité des tissus lors de l'irradiation à faible dose, via un «effet de témoin» ou «*bystander effect*», suggérant ainsi un modèle supra-linéaire [Balderson *et al.*, 2015, Hall, 2003]. On notera par ailleurs que pour les doses supérieures à 2 Sv, la question du modèle de risques reste également ouverte [Dasu *et al.*, 2005].

De plus, les données des survivants des bombes atomiques ne sont pas nécessairement transposables aux patients de radiothérapie, en raison de l'importante différence dans les conditions d'irradiation des deux populations. En particulier, le risque évalué pour les

4. Réponse des défenses de l'organisme suite à une stimulation par une faible dose d'un agent générateur de stress (toxines, radiations), qui peut conduire à des effets inverses à ceux observés pour une dose élevée.

patients en radiothérapie est généralement plus faible que celui des survivants des bombes atomiques [Little *et al.*, 1999, Berrington de González *et al.*, 2013]. Cet écart s'explique notamment par la présence de neutrons pour l'irradiation par les bombes atomiques [Schneider and Walsh, 2008], par le fractionnement de la dose [Le Pogam *et al.*, 2015, Schneider and Walsh, 2008] et par son inhomogénéité [Dasu *et al.*, 2005] en radiothérapie.

À la fois du fait de l'incertitude sur l'effet des faibles doses et compte tenu de la nécessité de prendre en compte le risque de second cancer dans le calcul du rapport entre le bénéfice et les risques associés à un traitement, de nombreux auteurs mettent en avant un besoin important de s'appuyer sur des données épidémiologiques concernant les faibles doses en radiothérapie [Tubiana, 2009b, Seong *et al.*, 2016, Xu *et al.*, 2008]. Cette nécessité souligne l'importance de connaître précisément toutes les doses reçues pour chaque traitement, même lorsqu'elles sont considérées comme faibles et même s'il s'avère que leur effet est inexistant, afin d'être en mesure de préciser les modèles de risques utilisés. Brenner *et al.* soulignent, notamment, qu'un risque faible, lorsqu'il est appliqué à une importante population, peut tout de même représenter un problème majeur de santé publique [Brenner *et al.*, 2003].

1.5 Conclusion

Le nombre de nouveaux cas de cancers est en constante augmentation, et il est aujourd'hui la principale cause de mortalité en France. D'origine génétique, cette maladie est causée par une accumulation de mutations dans l'ADN, qui, au fil du temps, peut causer une altération du mécanisme de division cellulaire menant à la formation d'une tumeur maligne. Les mutations surviennent naturellement dans l'organisme, mais peuvent avoir une origine externe : de nombreux agents mutagènes, dont certaines substances chimiques, les virus, l'alcool ou encore les rayonnements ionisants, sont capables de modifier le code génétique d'une cellule. L'exposition à ces facteurs de risque accroît ainsi la probabilité de développer un cancer. Plusieurs traitements sont possibles pour cette maladie, et la méthode utilisée dépend de la nature de la tumeur et du stade de la maladie. Globalement, l'évolution des traitements a permis, au cours des années, une augmentation progressive du taux de survie.

Parmi ces traitements, la radiothérapie utilise les propriétés ionisantes des rayonnements de haute énergie pour détruire les cellules tumorales et permettre une balance bénéfique/risque favorable, notamment grâce au fractionnement qui limite les effets secondaires à seuil en espaçant les séances d'irradiation pour laisser les tissus sains se réparer. De nombreuses techniques ont été développées pour conformer au mieux le champ d'irradiation à la forme de la tumeur, et ainsi réduire au maximum les doses reçues par les organes sains. Pour chaque traitement, ces doses sont optimisées par un logiciel de planification, qui assure qu'elles seront minimales compte tenu des contraintes de dose définies pour la tumeur.

Toutefois, les doses délivrées aux tissus sains ne peuvent jamais être nulles, et les dégâts causés sont liés à des effets secondaires aléatoires à long terme. En particulier, à la suite d'un traitement, on observe un risque accru de nouveaux cancers et des troubles cardiaques, auxquels les enfants sont particulièrement plus sensibles. Ces effets peuvent apparaître pour des doses relativement basses, mais, de manière générale, une incertitude considérable subsiste sur l'effet des faibles doses sur l'organisme. Cette incertitude met en avant un besoin croissant de données épidémiologiques sur les faibles doses, d'autant plus que (nous le verrons dans le chapitre suivant) les techniques modernes, qui conforment pourtant mieux les doses à la forme des tumeurs, semblent présenter davantage d'effets secondaires à long

terme. Elles tendent, en outre, à être de plus en plus utilisées, et un manque de recul important existe pour les plus récentes du fait de l'apparition très tardive des effets stochastiques.

Nous verrons que cette augmentation du risque de pathologies secondaires est liée à une dose délivrée en dehors du champ d'irradiation plus élevée pour les techniques récentes que pour les techniques classiques : la conformation du champ de traitement à la tumeur se fait au prix d'une irradiation plus importante à de faibles doses pour le reste du corps. Même si elles améliorent continuellement le taux de survie des patients ainsi que les effets secondaires précoces et tardifs, la question des effets à long terme causés par cette dose, appelée périphérique ou hors-champ, semble de plus en plus préoccupante. Le prochain chapitre dresse ainsi un bilan des connaissances liées à la dose hors-champ, dont la détermination devient indispensable non seulement pour étudier l'effet des faibles doses, mais également pour détenir toutes les informations et les facteurs de risques à prendre en compte dans la planification d'un traitement.

2 La dose hors-champ en radiothérapie

2.1 Introduction

Quels que soient les efforts de collimation réalisés, une partie des rayonnements atteint des organes sains du patient lors d'un traitement. Comme mentionné dans le chapitre précédent, aussi faible soit-elle, une irradiation est supposée susceptible de causer des effets à long terme, en particulier lorsque le patient survit longtemps après le traitement. La connaissance de toutes les doses reçues est nécessaire à la fois au niveau collectif pour l'étude de l'effet des faibles doses, qui reste aujourd'hui mal connu, et au niveau individuel pour quantifier l'augmentation du risque de second cancer ou de pathologie radio-induite à long terme causée par un traitement.

La première partie de ce chapitre décrit l'origine de ces rayonnements parasites, puis l'influence des techniques avancées de radiothérapie sur ceux-ci et sur leurs effets secondaires. Le risque de second cancer est, en effet, plus élevé pour les techniques les plus modernes en raison d'une différence dans la dose périphérique délivrée.

La seconde partie concerne l'estimation de cette dose : puisqu'il est important de la connaître, sa mesure systématique à chaque traitement pourrait être une solution. Nous verrons que cette méthode est difficilement envisageable, et l'utilisation d'autres outils permettant une prédiction de la dose est préférable. L'optimisation du traitement se concentre notamment sur la réduction des doses importantes à proximité de la zone de traitement, mais ne prend pas en compte les doses déposées à l'extérieur de celle-ci. Cette partie étudie ainsi la capacité des TPS à calculer les doses hors du champ, puis fait un état des lieux des autres outils dédiés entièrement à ce calcul.

La dernière partie, finalement, se concentre sur l'estimation de la dose périphérique par la méthode Monte-Carlo. Après une brève présentation de la méthode et des codes utilisant son principe en physique médicale, elle décrit les principaux obstacles à son utilisation pour le calcul de la dose périphérique, puis la solution envisagée qui fait l'objet de ce travail.

2.2 Caractéristiques et conséquences de la dose périphérique

2.2.1 Origine et particularités

Composantes de la dose hors-champ

Les collimateurs présents à la sortie de la tête de l'accélérateur et les blindages pouvant éventuellement l'entourer arrêtent la majorité des photons qui ne sont pas dirigés vers le champ de traitement. Les photons restants, formant alors un faisceau, constituent le rayonnement dit «primaire» de l'accélérateur. Toutefois, à cause de la nature aléatoire des déplacements de ces particules, il existe toujours une probabilité qu'elles puissent traverser la collimation ou être diffusées dans les différents éléments de l'accélérateur et dans le patient lui-même, formant ainsi le rayonnement dit «secondaire». Puisqu'elles peuvent être dirigées hors du faisceau, ces particules peuvent déposer leur énergie dans des régions éloignées de la tumeur, formant la dose périphérique ou hors-champ. Selon son origine, le rayonnement secondaire peut être séparé en trois composantes [Xu *et al.*, 2008], représentées ci-dessous sur la figure 13.

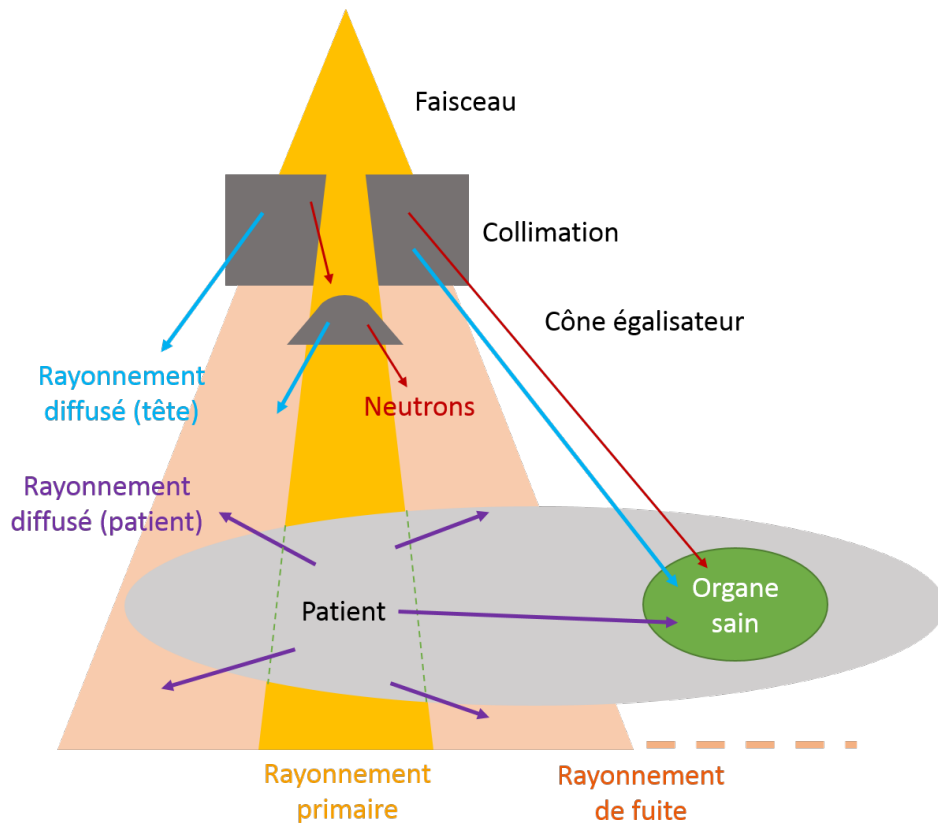


FIGURE 13 – Représentation des principales sources de rayonnement hors-champ en radiothérapie.

La première composante correspond au rayonnement diffusé dans le patient et son environnement. Elle provient principalement du champ de traitement où la majorité des photons du rayonnement primaire interagissent, mais peut également provenir de la table de traitement ou des éléments proches. La seconde composante est issue des particules diffusées dans la tête de l'accélérateur, notamment dans la collimation et le cône égalisateur. Enfin, la troisième composante correspond au rayonnement de fuite à travers l'accélérateur, traversant la collimation ou d'autres parties de la tête sans être arrêté.

L'importance de ces différentes composantes évolue avec la position, et notamment avec la distance au bord du champ. La figure 14, ci-dessous, représente la contribution des différentes composantes du rayonnement secondaire à la dose périphérique selon la distance au champ [Giessen and Hurkmans, 1993].

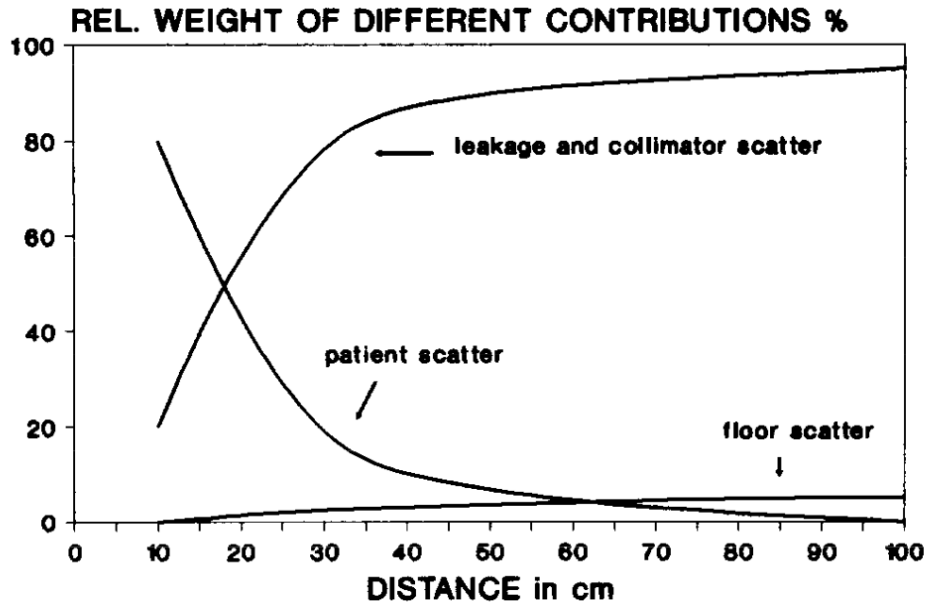


FIGURE 14 – [Giessen and Hurkmans, 1993] Variation relative des différentes contributions à la dose périphérique en fonction de la distance au champ, pour un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$.

La diffusion dans le patient est majoritaire à proximité du champ de traitement, mais sa contribution à la dose périphérique décroît rapidement avec la distance. La contribution combinée des fuites et des diffusions dans l'accélérateur est faible à proximité du champ, mais augmente rapidement pour devenir la principale source de dose périphérique après environ 17 cm dans le cas étudié par Giessen et al.

La proportion de la dose due uniquement aux diffusions dans l'accélérateur est de 20% à 40%, selon l'appareil utilisé, l'énergie des photons, la taille du champ et la distance jusqu'à la région traitée [Kase *et al.*, 1983]. La contribution individuelle des fuites de l'accélérateur est toujours faible, mais augmente avec la distance jusqu'à être prédominante après 60 cm pour des champs de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ et 40 cm pour des champs de $5 \times 5 \text{ cm}^2$ [Kase *et al.*, 1983].

En plus de ces trois sources de rayonnement secondaire, lorsque l'énergie des photons est suffisamment élevée, ceux-ci peuvent subir des réactions photonucléaires dans les matériaux de l'accélérateur, provoquant la production de neutrons qui irradient également à distance du champ. Ces interactions possèdent un seuil en énergie propre à chaque matériau, mais ce dernier se trouve généralement au-delà de 6 MeV. En radiothérapie, les neutrons apparaissent donc généralement pour des tensions supérieures à 6 MV, et leur contribution est considérée comme négligeable en dessous de 10 MV [Stovall, 1995]. En RCMI, la majorité des traitements sont réalisés à 6 MV et évitent ainsi la production de neutrons [Xu *et al.*, 2008].

Énergie des photons hors-champ

À cause de la contribution importante du rayonnement diffusé dans le patient et dans l'accélérateur, le spectre en énergie des photons hors-champ peut être très différent de celui rencontré dans la région traitée. Pour un faisceau de 6 MV, l'énergie moyenne des photons dans le champ, à la profondeur où la dose est maximale, est d'environ 1.6 MeV [Kry *et al.*, 2017]. À l'extérieur du champ, les photons provenant de diffusions ont déjà

perdu une partie de leur énergie et la moyenne se trouve plutôt entre 0.2 MeV et 0.6 MeV [Scarboro *et al.*, 2011, Edwards and Mountford, 2004]. Nous verrons par la suite en 2.3.1 que cette différence pose d'importants problèmes pour la mesure de la dose périphérique.

Variation avec la position de mesure et les paramètres d'irradiation

Du fait de son origine, la dose périphérique est loin d'être distribuée de manière homogène dans le patient, impliquant un risque de pathologie secondaire très largement variable selon la localisation du traitement et la région périphérique considérée. Cette dose peut, de plus, différer selon les paramètres d'irradiation et en particulier selon la taille du champ et l'énergie utilisée. De nombreuses études, toutefois, ont pu examiner le comportement de cette dose grâce à des mesures réalisées sur fantômes ou *in vivo*⁵, et observer de nombreux points communs entre les différentes modalités de traitement.

Quels que soient l'énergie, la taille du champ et le milieu irradié, la dose périphérique décroît avec la distance au bord du champ [Sherazi and Kase, 1985]. La majorité des études s'accordent pour affirmer qu'elle suit une décroissance exponentielle avec la distance, liée à l'atténuation des photons dans le milieu [Kase *et al.*, 1983, Mutic and Klein, 1999, Balasubramanian *et al.*, 2006, Stern, 1999, Stovall, 1995]. Cette décroissance est illustrée ci-dessous sur la figure 15, tirée d'une étude de Shahban *et al.*, dans laquelle la dose périphérique est mesurée à plusieurs profondeurs dans une cuve d'eau irradiée par une source de Cobalt 60.

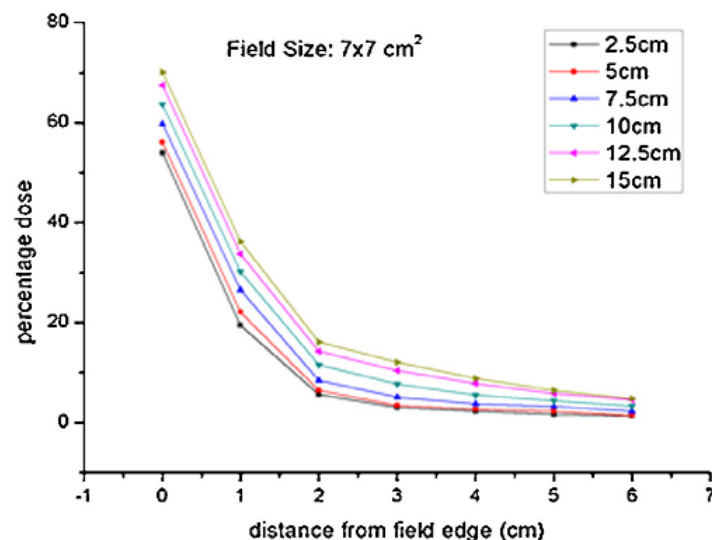


FIGURE 15 – [Shahban *et al.*, 2017] Évolution de la dose avec la distance au bord du champ, pour différentes profondeurs, dans le cas d'un fantôme d'eau irradié par une source de Cobalt 60 en champ $7 \times 7 \text{ cm}^2$. La valeur est donnée en pourcentage de la dose mesurée dans l'axe du faisceau pour chaque profondeur.

Les auteurs, ainsi que de nombreux autres, mettent également en évidence une augmentation de la dose périphérique avec la profondeur, visible ci-après sur la figure 16

5. Les méthodes de mesure de la dose périphérique sont décrites en 2.3.1.

pour plusieurs tailles de champs et deux distances latérales.

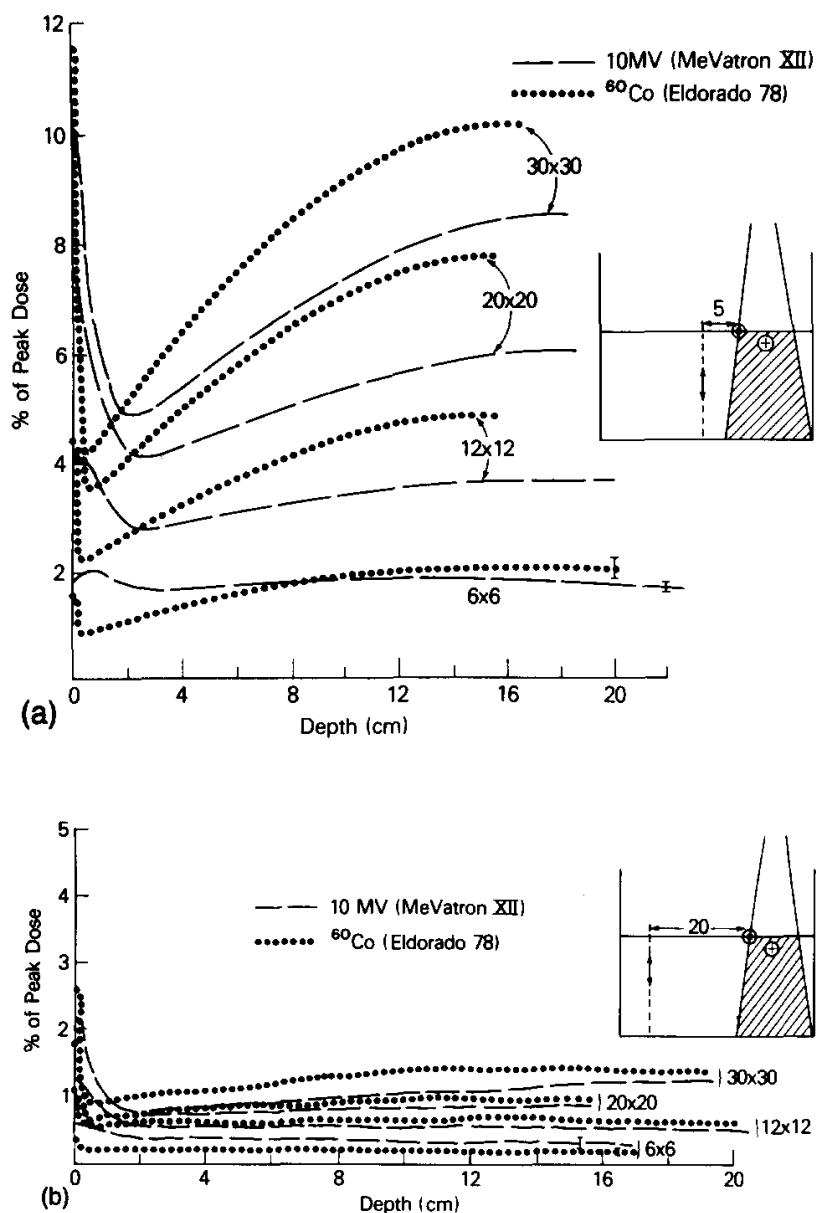


FIGURE 16 – [Fraass and Geijn, 1983] Évolution de la dose avec la profondeur pour différentes tailles de champ, à 5 cm (a) et à 20 cm (b) du bord de champ, dans le cas d'un fantôme d'eau irradié par un faisceau de 10 MV ou une source de Cobalt 60. La valeur est donnée en pourcentage de la dose maximale mesurée sur l'axe du faisceau pour chaque taille de champ.

Puisque l'origine des rayonnements secondaires est différente à proximité et à distance du champ, la variation de la dose périphérique avec la profondeur dépend directement de la distance par rapport à la zone de traitement. On voit sur la figure 16 que lorsque la mesure est effectuée à proximité du champ, la dose tend à augmenter avec la profondeur [Kase *et al.*, 1983, Fraass and Geijn, 1983, Shahban *et al.*, 2017]. Cette augmentation est due, premièrement, à une plus grande source de diffusions dans le patient (qui est la composante majoritaire à

cette distance) du fait de la divergence du faisceau. On observe ainsi une augmentation plus rapide avec la profondeur pour les grands champs, pour lesquels l'angle d'ouverture est plus important [Fraass and Geijn, 1983]. De plus, en profondeur, beaucoup de photons ont déjà perdu une partie de leur énergie et les diffusions Compton sont davantage susceptibles de les diriger hors de l'axe du faisceau [Shahban *et al.*, 2017]. À distance du champ, la figure 16 (b) montre que l'augmentation est moindre avec la profondeur. Puisque la proportion de la dose provenant des fuites et des diffusions dans la tête de l'accélérateur est plus élevée, l'effet des diffusions dans le faisceau observé précédemment est diminué. À des distances encore plus élevées, certains auteurs mettent en évidence une diminution de la dose périphérique avec la profondeur, due à l'atténuation des photons dans le milieu, qui proviennent alors presque exclusivement de la tête de l'accélérateur [Kase *et al.*, 1983]. Plusieurs études, de plus, relèvent une dose à la peau très élevée provenant des électrons de contamination, issus des interactions des photons dans la tête de l'accélérateur [Fraass and Geijn, 1983, Kry *et al.*, 2006].

De manière générale, un plus grand champ équivaut à une plus grande dose périphérique [Kase *et al.*, 1983, Kry *et al.*, 2017, Chofor *et al.*, 2010]. Lorsque les mâchoires sont écartées pour augmenter la taille du champ, la surface de diffusion des photons sur la collimation devient plus importante et la dose périphérique augmente, même à grande distance. Cet effet géométrique est illustré ci-après sur la figure 17.

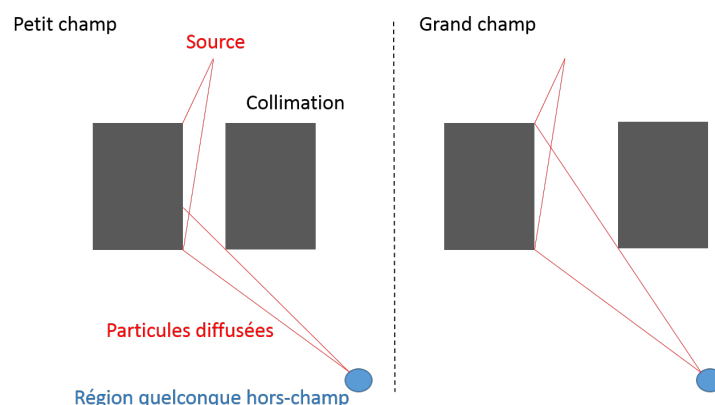


FIGURE 17 – Illustration de l'effet de la taille du champ sur les diffusions dans le collimateur : un champ plus grand équivaut à une plus grande surface de diffusion vers les régions hors-champ.

On a, de plus, davantage de diffusions dans le patient à cause du volume irradié plus important et donc une augmentation de cette composante du rayonnement secondaire [Kase *et al.*, 1983]. Cet effet est tout de même moins visible à grande distance du champ, lorsque les fuites prennent plus d'importance [Stovall, 1995, Fraass and Geijn, 1983].

Finalement, les études relèvent peu de variations avec l'énergie des photons émis [Kase *et al.*, 1983, Balasubramanian *et al.*, 2006, Stovall, 1995], avec tout de même une augmentation pour les traitements à haute énergie due à la présence de neutrons [Howell *et al.*, 2006]. Dans une étude des doses périphériques délivrées par un linac équipé d'un collimateur multilame avec une tension de 6 MV, Balasubramanian *et al.* évoquent, à 10 cm de profondeur, des doses équivalentes à 0,11 % de la dose dans l'axe à 20 cm du champ et 3,42 % à 5 cm, cette dernière valeur pouvant atteindre jusqu'à 5,03 % en présence

d'un filtre en coin. Pour un faisceau de 15 MV, les doses correspondent à 0,14 % de la dose dans l'axe à 20 cm, 3,07% à 5 cm, et 5,56 % avec un filtre en coin [Balasubramanian *et al.*, 2006].

Bien qu'ils puissent être très variables selon les conditions d'irradiation, la plupart des études rapportent des niveaux de dose hors-champ de l'ordre de quelques pourcents de la dose délivrée à la tumeur, équivalents à quelques cGy, sur des régions pouvant tout de même être étendues [Fraass and Geijn, 1983, Chofor *et al.*, 2010].

2.2.2 Influence des modalités d'irradiation sur la dose périphérique

Puisqu'il résulte notamment du passage des particules à travers la tête de l'accélérateur, le rayonnement secondaire dépend grandement de la structure de la machine utilisée et des paramètres d'irradiation. La dose hors-champ, quant à elle, est également liée au temps d'irradiation : si une modalité de traitement nécessite un temps plus long pour délivrer une même dose à la tumeur, alors la dose périphérique due aux fuites de la tête de la machine est susceptible d'augmenter. Or, les techniques avancées de radiothérapie modifient grandement la manière dont la dose est délivrée à la tumeur, à l'aide d'un ensemble varié d'accélérateurs, et présentent ainsi des niveaux de dose hors-champ très différents. Cette section dresse un rapide panorama de la dose périphérique rencontrée dans les diverses modalités de traitement.

RCMI

Dans une étude publiée en 2005, l'équipe de S. Kry rapporte que la dose périphérique associée aux traitements en RCMI est plus importante que pour les traitements en RC3D, à cause du nombre plus élevé d'unités moniteur (UM) nécessaires [Kry *et al.*, 2005, Purdy, 2008, Ruben *et al.*, 2011]. Une unité moniteur, propre à chaque accélérateur, est une quantité de rayonnement proportionnelle à la dose délivrée par la machine dans des conditions de référence. Puisque les techniques de RCMI ont notamment recours à une atténuation du faisceau pour moduler son intensité, un nombre d'UM plus élevé est nécessaire pour délivrer une même dose à la tumeur. Une augmentation du nombre d'UM signifie par conséquent une augmentation du temps d'irradiation (pouvant aller jusqu'à 2 à 10 fois le temps nécessaire en RC3D [Followill *et al.*, 1997, Reft *et al.*, 2006]), et donc davantage de dose due aux fuites. Le temps nécessaire est largement plus élevé pour l'irradiation en *sliding window* qu'en *step and shoot*, avec une différence pouvant aller jusqu'à un facteur 14 entre les deux techniques [Sharma *et al.*, 2006].

Dans la même étude de 2005, Kry *et al.* indiquent que la RCMI nécessite, dans le cas du traitement du cancer de la prostate, entre 3,5 et 4,9 fois plus d'UM que la radiothérapie 3D conventionnelle. Ces observations sont confirmées par le rapport TG-158 de l'American Association of Physicists in Medicine (AAPM), qui indique tout de même que le mode d'irradiation «Flattening Filter Free» (FFF, sans cône égalisateur) diminue le niveau de dose périphérique en réduisant le nombre d'éléments diffusants [Kry *et al.*, 2017]. L'utilisation d'un MLC est également susceptible de réduire les doses périphériques d'un facteur supérieur à 2 [Mutic and Klein, 1999]. À l'inverse, l'utilisation d'accessoires tels que les filtres en coin est susceptible de les augmenter d'un facteur 2 à 4 [Sherazi and Kase, 1985, Balasubramanian *et al.*, 2006].

Outre le temps d'irradiation plus important, la RCMI augmente également les volumes

concernés par les faibles doses [Chargari and Cosset, 2013, Purdy, 2008], en particulier à cause du nombre plus important de faisceaux utilisés [Wang and Xu, 2007]. L'augmentation du temps d'irradiation et des volumes irradiés occasionnent une augmentation de la dose pour de nombreux organes à distance du champ [Howell *et al.*, 2006]. Pour un traitement de la prostate, à 40 cm du champ, Wang et al. rapportent une dose pouvant être jusqu'à 3 à 5 fois plus élevée en RCMI qu'en RC3D [Wang and Xu, 2007]; pour des traitements de la tête et du cou, l'équipe de D. Verellen estime une dose corps entier de 1969 mSv pour la RCMI contre 242 mSv pour la RC3D, ce qui représente une augmentation d'un facteur 8 du risque de second cancer [Verellen and Vanhavere, 2000]. Dans le cas des traitements pédiatriques, Klein et al. estiment que la dose proche du champ (à moins de 10 cm) est plus faible en RCMI qu'en RC3D, à cause des tailles de champ utilisées, généralement plus faibles, qui entraînent donc moins de diffusions dans le patient [Klein *et al.*, 2006]. En revanche, cet effet s'estompe à plus grande distance face à l'augmentation du nombre d'UM nécessaires, et la dose devient plus importante.

De manière plus générale, les doses périphériques observées en RCMI diffèrent grandement d'un traitement à l'autre. Tirée du rapport TG-158 de l'AAPM, la figure 18 ci-après représente l'évolution de la dose efficace hors-champ, par gray délivré à la tumeur, en fonction de la distance, pour différents traitements en RCMI (et un en tomothérapie).

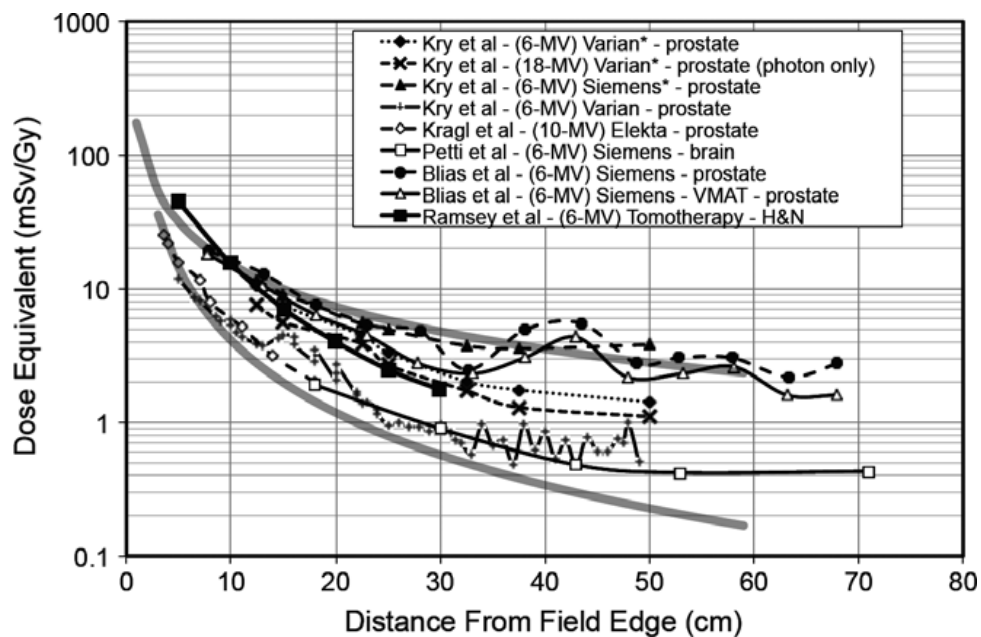


FIGURE 18 – [Kry *et al.*, 2017] Dose efficace (mSv/Gy) pour différents traitements en RCMI, en fonction de la distance au bord du champ. L'astérisque indique un traitement avec une forte modulation d'intensité, et les courbes continues représentent l'étendue empirique des doses périphériques associées à ces traitements.

Non seulement les valeurs de dose, à une même distance du champ, sont très différentes selon l'énergie des photons, la localisation de la tumeur et la machine utilisée, mais cette différence tend également à s'accroître avec la distance. Les traitements en RCMI sont donc associés à des doses périphériques très variées, et une même modalité de traitement ne signifie pas nécessairement une dose périphérique équivalente. Joosten et al. estiment,

notamment, que la dose périphérique peut varier d'un facteur 9 à 10 d'un modèle de linac à l'autre [Joosten *et al.*, 2011].

Stéréotaxie

Malgré des tailles de champ largement plus faibles qu'en RCMI, la stéréotaxie, elle aussi, augmente les volumes concernés par les faibles doses [Chargari and Cosset, 2013]. Elle accroît de manière importante la dose périphérique [Shepherd *et al.*, 1997], jusqu'à des niveaux pouvant atteindre 4 fois ceux observés en RCMI pour des traitements par CyberKnife® [Petti *et al.*, 2006]. Également tirée du rapport TG-158 de l'AAPM, la figure 19 ci-après représente l'évolution de la dose hors-champ par gray délivré à la tumeur en fonction la distance, pour différents traitement en stéréotaxie.

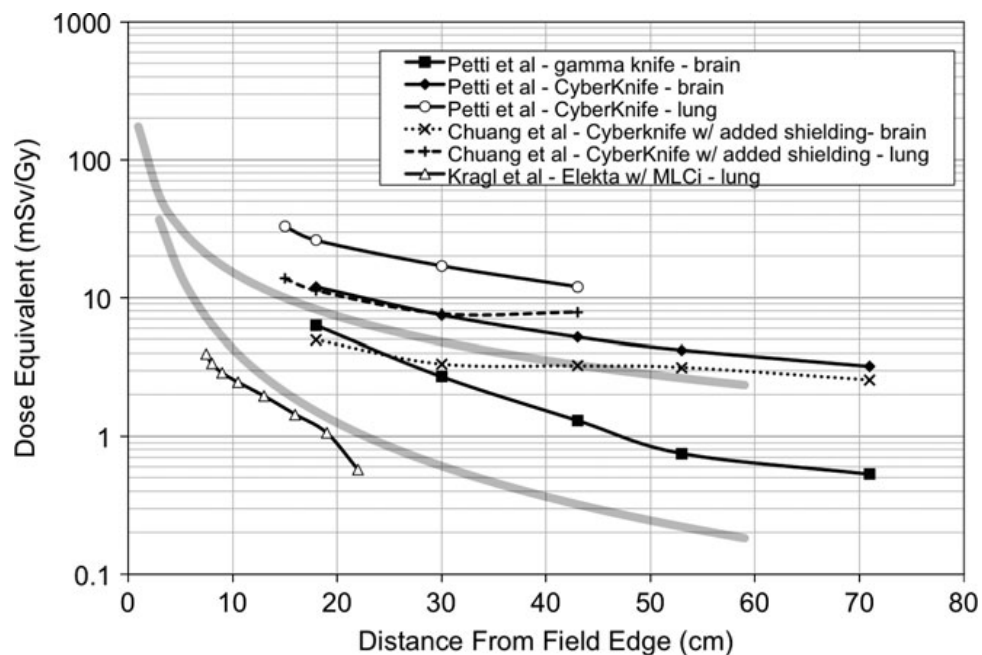


FIGURE 19 – [Kry *et al.*, 2017] Dose (mSv/Gy) pour différents traitements en stéréotaxie, en fonction de la distance au bord du champ. Les courbes continues représentent l'étendue empirique des doses périphériques associées aux traitements en RCMI (reportées de la figure 18).

De même que pour les traitements par RCMI (figure 18), on observe une grande disparité dans les doses périphériques d'une configuration à l'autre, et les écarts augmentent avec la distance au champ. On constate, toutefois, que les doses périphériques mesurées pour les traitements stéréotaxiques sont généralement plus élevées que celles obtenues en RCMI. Cette augmentation est principalement due aux fuites et aux diffusions dans le collimateur [Petti *et al.*, 2006, Vlachopoulou *et al.*, 2011], et la dose hors-champ est ainsi directement proportionnelle au nombre d'UM à partir de 40 cm du champ [Petti *et al.*, 2006]. Le nombre d'UM nécessaires à un traitement par CyberKnife® est, de plus, supérieur à celui nécessaire pour les autres modalités de traitement, entraînant une dose hors-champ 2 à 5 fois plus élevée que pour le GammaKnife® [Petti *et al.*, 2006].

L'installation d'un blindage supplémentaire dans le Cyberknife[®] peut, toutefois, diminuer la dose jusqu'à 59% à moins de 30 cm du champ et entre 20% et 55% au-delà [Chuang *et al.*, 2008]. La dose périphérique est également plus faible pour des modèles plus récents du CyberKnife[®] [Delaby *et al.*, 2016].

Dans le cas des traitements par GammaKnife[®], les doses proches du champ sont supérieures à celles observées pour le CyberKnife[®] ou pour des accélérateurs linéaires conventionnels. En revanche, à distance du champ, Zytkovicz et al. rapportent que les doses périphériques sont bien plus faibles que dans le cas du CyberKnife[®]. Notamment, pour un traitement oculaire, les doses mesurées au pelvis peuvent être inférieures d'un ordre de grandeur à celles obtenues avec le CyberKnife[®] [Zytkovicz *et al.*, 2007].

Arcthérapie

En comparaison à la RCMI et de la stéréotaxie, les études sur le VMAT sont relativement peu nombreuses. Le traitement en VMAT, du fait de la rotation du faisceau, augmente la composante de diffusion dans le patient et présente des doses plus élevées à proximité du champ par rapport à la RCMI, pour laquelle les doses dans les organes éloignés sont plus importantes à cause des fuites de la tête de l'accélérateur [Poeta *et al.*, 2015]. De manière générale, les doses hors-champ semblent tout de même plus faibles qu'en RCMI [Hauri and Schneider, 2019, Blais *et al.*, 2012, Krishnan *et al.*, 2019], toujours en raison d'un temps d'irradiation moins important. Le rapport TG-158 de l'AAPM relève, pour le traitement de la prostate, 16% à 39% d'UM en moins par rapport à la RCMI *step and shoot*, et 42% à 68% d'UM en moins par rapport à l'irradiation en *sliding window* [Kry *et al.*, 2017].

Tomothérapie

Enfin, le niveau de dose hors-champ en tomothérapie est similaire à celui de la RCMI, également à cause du temps important nécessaire à l'irradiation [Meeks *et al.*, 2002], pouvant être jusqu'à 15 fois plus élevé qu'en RC3D pour délivrer une même dose à la tumeur [Ramsey, 2006].

2.2.3 Effets secondaires des techniques de radiothérapie avancées

Les effets secondaires présentés en 1.4 sont directement liés à l'irradiation des tissus sains du patient. Or, nous venons de voir que la dose peut grandement varier d'une technique de radiothérapie à l'autre : inévitablement, il en est de même pour le risque de pathologie radio-induite.

Risque d'effets à long terme des techniques modernes

Dans ce contexte, un grand nombre d'études se concentrent sur l'effet de l'introduction de la RCMI sur le risque de second cancer. La grande majorité d'entre elles s'accordent sur ce point : le risque est largement accru en raison des doses périphériques plus importantes. Dès 1997, Followill et al. s'inquiètent d'une possible augmentation du risque de second cancer due à la RCMI en raison de la hausse du nombre d'UM nécessaires aux traitements [Followill *et al.*, 1997]. Cette inquiétude est partagée par de nombreux auteurs, et il est

aujourd'hui largement admis que ce risque est directement lié à la dose périphérique [Purdy, 2008, Brenner *et al.*, 2003, Hall and Wu, 2003]. Notamment, Schneider *et al.*, en 2006, calculent une augmentation de 15% du risque de cancer en RCMI à 6 MV par rapport à la radiothérapie conventionnelle, et jusqu'à 60% pour les traitements à 18 MV [Schneider *et al.*, 2006]. Hall *et al.* estiment que la RCMI est susceptible de doubler le risque de cancer radio-induit chez les patients survivants plus de 10 ans, et encore davantage pour les patients survivant plus longtemps ou étant plus jeunes au moment du traitement [Hall and Wu, 2003]. Stathakis *et al.*, de même, estiment que la RCMI double le risque de second cancer [Stathakis *et al.*, 2007]. De leur côté, Chargari *et al.* indiquent que, puisqu'il s'agit de faibles doses, les estimations de la probabilité de second cancer dépendent grandement du modèle de risque utilisé ; avec un modèle linéaire sans seuil, la RCMI pourrait également doubler la probabilité de cancer secondaire [Chargari and Cosset, 2013].

Les études sont moins nombreuses pour les autres techniques de radiothérapie, et les tendances sont beaucoup moins claires. Dans le cas de la tomothérapie, l'étude de Followill *et al.* de 1997 estime que la probabilité de second cancer, pour une irradiation à 70 Gy d'une tumeur à l'aide d'un faisceau de 6 MV, est de 2.8% contre 1% pour la RCMI et 0.4% pour la radiothérapie standard [Followill *et al.*, 1997]. En 1998, Mutic *et al.* estiment cette première probabilité à 1.35%, soit environ la moitié de risque estimé précédemment [Mutic and Low, 1998]. Plus récemment, en 2015, Han *et al.* rapportent qu'à l'inverse, la tomothérapie semblerait présenter un risque de second cancer plus faible que la RCMI pour le traitement du cancer du sein [Han *et al.*, 2015] ; en 2013, Kim *et al.* déclarent que le risque pour un traitement du poumon serait plus faible en tomothérapie qu'en RCMI et en VMAT pour les organes proches du champ, et similaire à plus grande distance [Kim *et al.*, 2013].

Pour les traitements par VMAT, le risque estimé par l'étude de Rehman *et al.* est plus faible que celui obtenu pour la RCMI, ce qui semble en accord avec la réduction observée des doses périphériques, mais il est également plus faible que le risque occasionné par la RC3D [Rehman *et al.*, 2018]. Lee *et al.*, en revanche, estiment que le risque de second cancer est plus élevé pour les traitement en VMAT qu'en RC3D [Lee *et al.*, 2014].

Enfin, l'étude de Chargari *et al.* fait état d'un risque accru pour la stéréotaxie [Chargari and Cosset, 2013], ce qui est à nouveau en accord avec le niveau de dose important constaté pour cette modalité.

Problématique de l'estimation du risque

Les doses estimées restent difficilement comparables aux doses reçues durant un traitement, étant généralement mesurées ponctuellement dans des fantômes d'eau ou anthropomorphes. De plus, il existe peu d'études sur les accélérateurs les plus récents, qui possèdent néanmoins chacun leur propre structure et qui induisent donc des distributions de doses hors-champ uniques. Le recul n'est aujourd'hui pas suffisant pour estimer correctement le risque de pathologie secondaire à long terme lié aux techniques modernes, puisque ces complications surviennent généralement au moins une dizaine d'années après la fin du traitement [Journey *et al.*, 2018]. Il existe donc peu de données sur les techniques les plus récentes, qui sont pourtant nécessaires aux études épidémiologiques et à l'évaluation des risques liés aux faibles doses. La figure 20, ci-dessous, est tirée d'un rapport du National Research Council sur l'utilisation épidémiologique de la reconstruction de dose et représente la taille de l'échantillon nécessaire pour obtenir une estimation significative du risque de

second cancer, de leucémie et de pathologie respiratoire en fonction de la dose reçue.

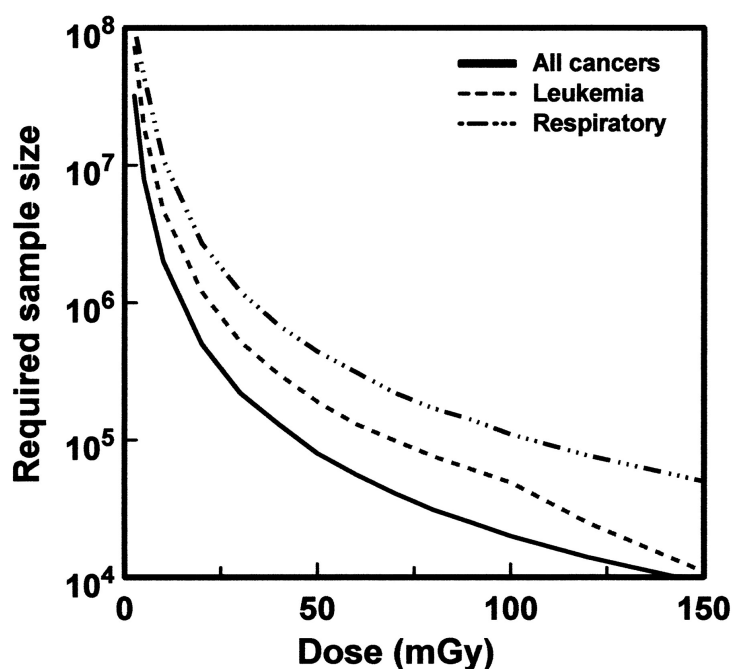


FIGURE 20 – [National Research Council, 1995] Taille de la cohorte nécessaire pour obtenir des résultats significatifs sur le risque de pathologies radio-induites en fonction de la dose reçue, en supposant un suivi tout au long de la vie.

Cette figure met en évidence le besoin de données importantes concernant les irradiations à de faibles doses en radiothérapie, de manière à pouvoir observer des effets potentiellement très faibles. Toutefois, la grande hétérogénéité des résultats obtenus dans la littérature pour différentes modalités et conditions d'irradiation rend très difficile l'estimation d'une dose périphérique pour un traitement particulier sans en faire directement la mesure ou le calcul. En conséquence, il est nécessaire d'avoir à disposition des méthodes d'estimation des doses périphériques précises et applicables à chaque traitement, à la fois pour compléter les données épidémiologiques et pour prendre en compte le risque de second cancer dans la planification du traitement. La section suivante résume ainsi les différents moyens aujourd'hui à disposition pour l'estimation de la dose périphérique.

2.3 Estimation de la dose hors-champ

2.3.1 Connaissance par mesures

Dispositifs de mesure

Le dispositif le plus simple utilisé pour effectuer des mesures de dose est le fantôme d'eau ou cuve à eau. Ce terme désigne généralement une cuve parallélépipédique remplie d'eau, dont les propriétés dosimétriques sont similaires à celles des tissus d'un patient, et dont les parois sont également composées d'un matériau aux propriétés semblables. Bien que le fantôme d'eau seul ne simule pas les différences de densité à l'intérieur du corps, il est généralement considéré comme une bonne approximation pour un patient et est

beaucoup utilisé, notamment pour sa simplicité de mise en œuvre. Pour les mesures de dose périphérique, toutefois, la cuve doit être suffisamment grande pour pouvoir réaliser des mesures à distance du champ, ce qui n'est généralement pas le cas. Parmi les études citées précédemment, Fraass et al. utilisent deux cuves côte à côte pour simuler un fantôme de grande taille [Fraass and Geijn, 1983]. Les fantômes d'eau sont également employés par Stovall et al., Ruben et al. [Stovall, 1995, Ruben *et al.*, 2011] ainsi que Kase et al., qui choisissent ce dispositif afin de faciliter les comparaisons de doses périphériques provenant de chaque composante du rayonnement secondaire [Kase *et al.*, 1983].

Plus réalistes, les fantômes anthropomorphes sont un dispositif de forme humanoïde, composé de matériaux imitant les propriétés dosimétriques des tissus humains. Ils peuvent être plus ou moins détaillés, comme le montre la figure 21 ci-après, et ainsi présenter plusieurs niveaux de réalisme dosimétrique.

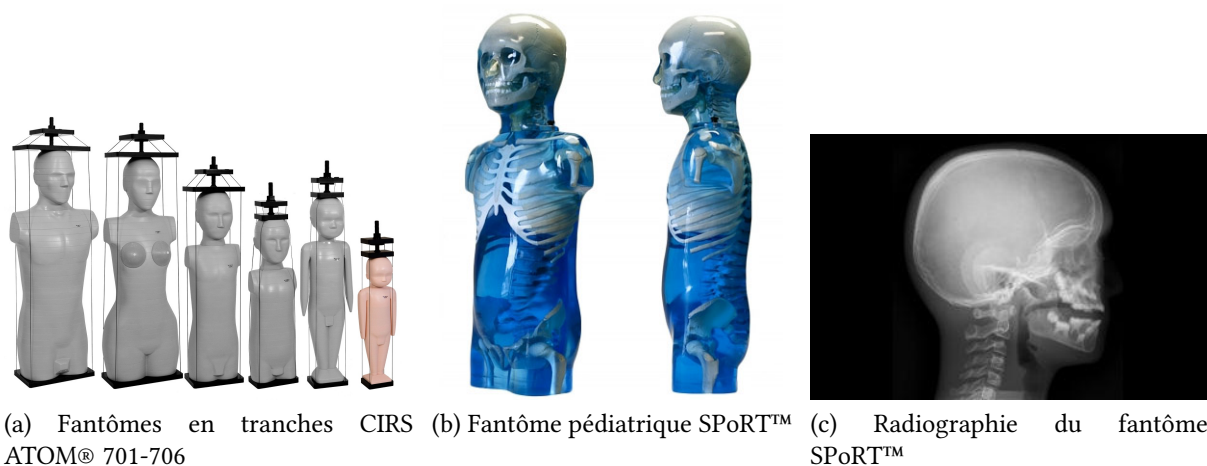


FIGURE 21 – Exemples de fantômes anthropomorphes avec différents niveaux de détail. La radiographie de tels fantômes, en (c), montre la similitude des propriétés d'atténuation de leurs matériaux avec celles de véritables patients. (sources : (a) www.dicardiology.com (b,c) jrtassociates.com)

Ces fantômes peuvent exister sous plusieurs modèles et représenter des situations très variées. La plupart d'entre eux possèdent des espaces dédiés aux détecteurs, permettant des mesures de dose en conditions bien plus réalistes qu'avec les cuves à eau. Notamment, Rehman et al. utilisent ce type de fantômes pour simuler un traitement complet, depuis l'imagerie jusqu'à l'irradiation, en passant notamment par la planification effectuée à partir des images scanographiques acquises, pour étudier le risque de second cancer lors de traitements de la tête et du cou [Rehman *et al.*, 2018].

Le rapport TG-158 de l'AAPM indique que les fantômes anthropomorphes semblent naturellement les mieux adaptés pour la mesure de la dose périphérique. Ils permettent en effet, en plus de la prise en compte des hétérogénéités, une localisation plus précise des organes à risque et une meilleure connaissance des distances au champ, qui sont essentielles dans le cas de la dose périphérique à cause de sa variation rapide [Kry *et al.*, 2017]. Le rapport indique, toutefois, qu'aucune comparaison n'a été effectuée entre les différents types de fantômes.

Enfin, la configuration la plus réaliste reste la mesure *in vivo*, dans laquelle des détecteurs sont directement placés sur le patient au cours de l'irradiation. Toutefois, puisque ceux-ci sont nécessairement placés en surface et puisque la variation de la dose périphérique peut être importante avec la profondeur, les détecteurs peuvent sous-estimer la dose due aux diffusions dans le patient [Verellen and Vanhavere, 2000] ou au contraire la surestimer à cause des électrons de contamination [Kry *et al.*, 2017]. La mesure est donc fiable seulement à grande distance du champ où la composante de fuites et de diffusions dans la tête de l'accélérateur est prépondérante devant la diffusion dans le patient [Verellen and Vanhavere, 2000]. Enfin, la mesure *in vivo* se faisant durant le traitement, le risque induit par la dose périphérique ne peut être connu qu'*a posteriori* et ne peut pas être inclus dans la planification.

Détecteurs pour la dose périphérique

À cause de la nature des rayonnements secondaires, la mesure de la dose périphérique peut poser des difficultés importantes. Le rapport TG-158 de l'AAPM relève quatre principaux obstacles [Kry *et al.*, 2017] :

- De nombreux dosimètres sont sensibles à l'énergie des photons incidents : étant généralement étalonnés pour des énergies plus élevées que celles rencontrées hors-champ, la mesure de la dose périphérique peut être incorrecte; notamment, les détecteurs constitués d'un matériau de numéro atomique élevé ont tendance à la surestimer,
- La variation de la dose périphérique avec la profondeur présente un important pic en surface à cause des électrons de contamination provenant de l'accélérateur; un dosimètre placé en surface surestimerait donc très largement la dose (jusqu'à un facteur 5),
- Les débits de dose rencontrés étant faibles, le temps nécessaire à la mesure est important et le nombre d'UM délivrées doit être supérieur à celui utilisé en conditions cliniques, ce qui exclut souvent les mesures *in vivo*,
- Pour les énergies les plus élevées, la dose provient d'un mélange de photons, d'électrons et de neutrons. Chacune de ces particules est susceptible d'induire une réponse différente dans un détecteur, et des précautions doivent être prises pour bien prendre en compte chaque contribution.

Une étude spécifique à chaque détecteur est nécessaire pour déterminer s'il est approprié pour une mesure de dose périphérique, mais il est tout de même possible de donner une vue d'ensemble des grands types de dosimètres.

Détecteurs à luminescence

Globalement, les dosimètres thermoluminescents (TLD) et à luminescence optiquement stimulée (OSL) tendent à surestimer la dose hors-champ. Notamment, les OSL de type $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ présentent une surestimation de la dose allant de 5% à 31% [Scarboro *et al.*, 2012]. Les détecteurs de type LiF, quant à eux, fournissent une valeur de dose jusqu'à 12% trop élevée s'ils ont été étalonnés pour un faisceau de 6 MV, à cause de la probabilité plus importante d'effet photoélectrique à basse énergie [Scarboro *et al.*, 2011]. Cet écart est encore plus grand pour les détecteurs basés sur le calcium [Kry *et al.*, 2017]. D'autres études, toutefois,

indiquent qu'ils peuvent être adaptés à la mesure hors-champ via une correction individuelle [Knežević *et al.*, 2011]. Ces détecteurs semblent, de plus, présenter une réponse en dose linéaire jusqu'à des valeurs relativement faibles (quelques mGy) [Massillon-JL *et al.*, 2006] et leur utilisation ne nécessite donc pas nécessairement de prolonger l'irradiation. Dans le cas des dosimètres radiophotoluminescents (RPL), aucune correction ne semble nécessaire; la réponse en dose est linéaire de 0,5 Gy à 30 Gy, et est très proche de la linéarité de 1 mGy à 500 mGy [Knežević *et al.*, 2011, Knežević *et al.*, 2013]

Chambre d'ionisation

La réponse des chambres d'ionisation dépend principalement de la composition de l'électrode centrale. Les chambres dont l'électrode est constituée d'un matériau à numéro atomique faible ($Z < 13$) présentent une dépendance en énergie inférieure à 5% jusqu'à 40 keV [Kry *et al.*, 2017]. À l'inverse, les chambres dont l'électrode centrale est composée d'un matériau à Z élevé (> 13) surestiment la dose périphérique d'au moins 50% à 100 keV, et encore davantage à des énergies plus faibles [Snow *et al.*, 2013]. Le rapport de l'AAPM mentionne également que les chambres peuvent poser des difficultés d'utilisation *in vivo* à cause de leur taille, de l'électronique, et du câblage nécessaires.

Diodes

Le principal problème rencontré lors de l'utilisation des diodes est une surestimation de la dose périphérique, à nouveau causée par les matériaux à Z élevé. Les études qui se concentrent sur les diodes EDD-5 rapportent une erreur de près de deux tiers à basse énergie [Edwards and Mountford, 2004], et de 70% à seulement 1 cm de la limite du champ [Saini and Zhu, 2007]. De plus, même avec des diodes conçues pour les énergies faibles, des corrections sont nécessaires et des incertitudes importantes subsistent sur la valeur obtenue [Kry *et al.*, 2017].

Films radiochromiques

Les films radiochromiques ont l'avantage d'avoir un numéro atomique proche de celui des tissus mais, bien que la dépendance en énergie reste faible, elle est tout de même présente : pour les films EBT, la dose hors-champ est sous-estimée jusqu'à 8% [Butson *et al.*, 2006], tandis que les films EBT2 et EBT3 la surestiment de 5 à 10% [Butson *et al.*, 2010, Massillon-Jl *et al.*, 2012]. Il peut être, de plus, difficile de concevoir une courbe d'étalonnage pour l'application aux doses hors-champ tant leur amplitude peut être importante.

Détecteurs MOSFET

Les détecteurs de type MOSFET («*Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor*») présentent une faible dépendance en énergie dans le faisceau (3%) [Chuang *et al.*, 2002], mais celle-ci est beaucoup plus importante en dehors du champ et conduit à une surestimation de la dose de 50% à 600% [Kry *et al.*, 2017].

2.3.2 Connaissance par calcul

De par les difficultés citées précédemment, la méthodologie de mesure de la dose périphérique est difficilement applicable à chaque traitement : beaucoup de détecteurs nécessitent un étalonnage pour une énergie relativement précise, qui n'est pas forcément connue à l'avance, ou ne sont pas utilisables dans des conditions cliniques. Puisqu'il peut être nécessaire de connaître la dose périphérique à l'avance pour l'inclure dans la planification du traitement, il serait très avantageux d'être en mesure de prédire cette dose à l'aide d'outils numériques.

Calcul par les logiciels de planification de traitement

La dose déposée au cours d'un traitement est toujours calculée dans le champ d'irradiation par les TPS, en amont d'une séance, via des algorithmes en partie analytiques propres à chaque modèle de linac. Ces derniers, cependant, ne sont pas conçus pour l'estimation de la dose hors-champ [Das *et al.*, 2008] et celle-ci n'est donc jamais calculée en routine clinique. De nombreuses études ont pu montrer que ces logiciels, bien qu'ils donnent une valeur de dose à proximité du champ, fournissent des résultats souvent incorrects dès les limites de celui-ci atteintes et tendent à sous-estimer la dose périphérique quel que soit l'algorithme utilisé [Kry *et al.*, 2017].

Les études visant à quantifier l'erreur commise par les TPS à proximité et à distance du champ existent aujourd'hui pour la majorité des algorithmes et des TPS utilisés. Le rapport TG-158 de l'AAPM précise que les différences avec la dose mesurée peuvent aller jusqu'à 30% à seulement 3 cm de la limite du champ, et augmenter encore de manière importante avec la distance [Kry *et al.*, 2017].

Le TPS Pinnacle3 de Philips (version 9.0), pour un plan de traitement en RCMI, calcule la dose périphérique jusqu'à 40 cm de la limite du champ. La valeur est cependant sous-estimée en moyenne de 50%, et cette différence peut même atteindre jusqu'à 100% [Huang *et al.*, 2013].

Des résultats similaires sont obtenus par Joosten *et al.* pour le TPS CMS XiO d'Elekta (version 4.60) [Joosten *et al.*, 2011], pour lequel les diffusions dans la tête de l'accélérateur ne sont pas modélisées de manière correcte, pouvant conduire à une erreur de près de 70% [Joosten *et al.*, 2013]. Dans cet article, les auteurs concluent par ailleurs qu'un TPS commercial ne doit pas être utilisé pour le calcul de la dose hors-champ.

Les TPS utilisés en tomothérapie et celui du CyberKnife[®] sous-estiment eux aussi très largement la dose périphérique [Schneider *et al.*, 2013], et le TPS Multiplan du Cyberknife[®] est considéré comme inadapté pour son calcul [Colnot, 2019].

Howell *et al.*, en 2010, étudient le TPS Eclipse de Varian (version 8.6) pour des distances de 3,75 à 11,25 cm du champ, et observent que la dose obtenue peut être sous-estimée jusqu'à 55% [Howell *et al.*, 2010]. Ce résultat est semblable à celui obtenu par Mille *et al.*, qui indiquent qu'Eclipse est inadapté hors du champ, quel que soit l'algorithme utilisé (AAA ou Acuros XB), et fonctionne seulement si les organes sont au moins partiellement dans le champ [Mille *et al.*, 2018]. La figure 22 ci-dessous, tirée de leur étude, présente les profils de dose obtenus pour une planification de traitement par différentes méthodes, dont les deux algorithmes du TPS Eclipse.

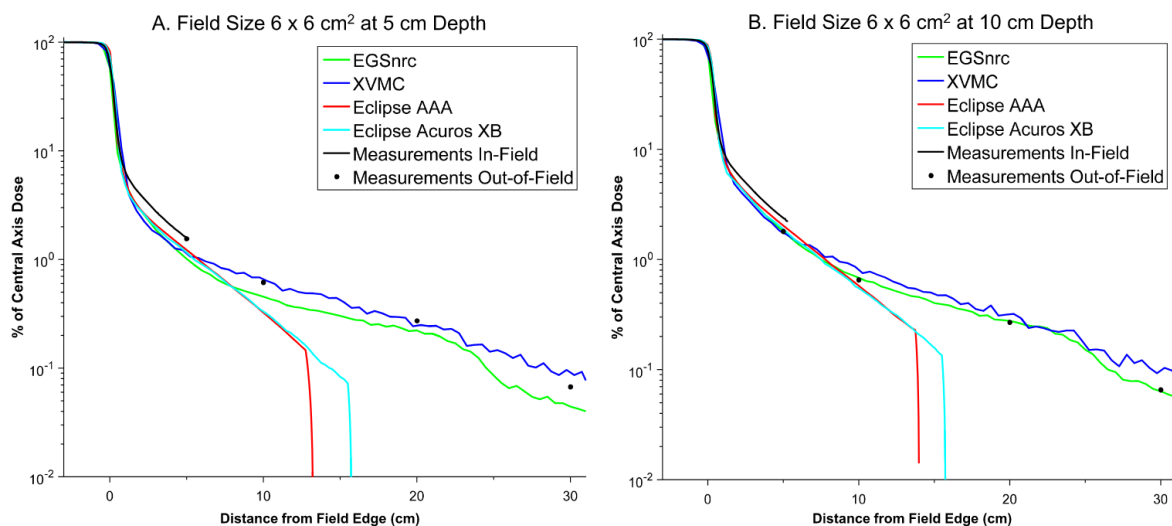


FIGURE 22 – [Mille *et al.*, 2018] Comparaison des profils de dose obtenus par mesure, par simulation Monte-Carlo et par calcul via le TPS Eclipse (algorithmes AAA et Acuros XB), pour des tailles de champ $6 \times 6 \text{ cm}^2$, à 5 et 10 cm de profondeur dans un fantôme d'eau pour un traitement à 6 MV.

Ce résultat met d'abord en valeur un écart non seulement élevé entre la dose mesurée et la dose calculée par le TPS, mais également croissant avec la distance. Il montre de plus que la dose fournie par le TPS est nulle à partir d'une certaine distance propre à chaque algorithme, ce qui est une caractéristique commune à tous les TPS. Dans une autre étude, Van Den Heuvel *et al.* rapportent que l'algorithme AAA d'Eclipse sous-estime encore davantage la dose pour des traitements plus complexes, et ne donne aucun résultat au-delà de 20 cm [van den Heuvel *et al.*, 2012]. De même, l'algorithme Plato Sunrise de Nucletron (Elekta), utilisé par Balasubramanian *et al.* pour une étude de l'impact du MLC sur les doses hors-champ, ne donne plus aucune valeur au-delà de 20 cm du champ [Balasubramanian *et al.*, 2006].

Devant l'accumulation de données montrant l'incapacité des TPS à calculer la dose périphérique, il paraît indispensable de se tourner vers des approches spécifiques à ce type d'estimations. Plusieurs outils dédiés à la dose périphérique ont ainsi été conçus et peuvent être utilisés en complément des TPS.

Outils dédiés

À l'origine, la dose périphérique était estimée à l'aide de modèles empiriques, basés principalement sur des mesures réalisées en cuve à eau [Diallo *et al.*, 1996, Francois *et al.*, 1988]. Elle pouvait également être connue, bien que de manière très approximative, via une extrapolation des doses obtenues dans le volume de traitement ou en comparant un traitement à d'autres exemples similaires pour lesquels les doses sont connues. Néanmoins, ces modèles ne peuvent donner qu'une estimation grossière de la dose hors-champ et ils ont par la suite été raffinés en utilisant les données provenant des nombreuses études mesurant les doses périphériques. Ces modèles empiriques décomposent la dose en contributions de chaque type de rayonnement secondaire pour en donner une

expression analytique, qui prend généralement la forme :

$$D_p = D_{\text{Diffusions-acc}} + D_{\text{Fuites}} + D_{\text{Diffusions-patient}}$$

Où la dose périphérique en un point D_p est vue comme la somme de la dose provenant des diffusions dans le linac $D_{\text{Diffusions-acc}}$, de la dose provenant des fuites de la tête de la machine D_{Fuites} , et de la dose issue des diffusions dans le patient $D_{\text{Diffusions-patient}}$. Chaque terme de la somme peut être modélisé de manière différente selon l'algorithme développé, et, pour certains d'entre eux, ils dépendent des conditions d'irradiation (énergie, taille de champ...), permettant d'adapter le modèle à plusieurs techniques de traitement.

Jagetic et al. développent notamment un modèle empirique simple, destiné à servir de fondation pour d'autres travaux. Bien que très rapide, l'algorithme utilisé est cependant limité à des faisceaux de 6 MV et à des calculs dans des fantômes d'eau ; il présente également une erreur pouvant aller jusqu'à 10 % [Jagetic and Newhauser, 2015, Newhauser et al., 2017]. Ce modèle a ensuite été généralisé par Schneider et al. pour une utilisation de 4 à 25 MV et d'autres modalités de traitement [Schneider et al., 2017]. Pour cette seconde version, l'erreur sur la dose hors-champ est en moyenne de 10 % et peut atteindre jusqu'à 33 %. Taddei et al. proposent également un modèle analytique pour calculer la dose périphérique, mais celui-ci est toutefois limité à l'irradiation craniospinale [Taddei et al., 2013]. Le rapport TG-158 de l'AAPM indique que ce type de modèles présentent une erreur typique d'environ 30 % [Kry et al., 2007a], mais que celle-ci peut éventuellement être bien plus importante [Kry et al., 2017].

D'autres modèles, plus précis et plus généraux, ont également été conçus et sont notamment utilisables pour estimer la dose reçue en RCMI. Le modèle de Hauri et al. utilise une approche mixte : le calcul est empirique pour les termes D_{Fuites} et $D_{\text{Diffusions-acc}}$, et physique pour $D_{\text{Diffusions-patient}}$ [Hauri et al., 2016]. L'erreur rapportée est en moyenne de 11 %, mais peut atteindre 44 %.

Un outil aujourd'hui très utilisé est le code Peridose, qui est l'algorithme le plus général pour le calcul des doses périphériques [Giessen, 2001]. Il a cependant été conçu seulement pour des champs rectangulaires [Sanchez et al., 2015], et bien qu'il fonctionne de manière convenable pour des traitements classiques, il peut produire des erreurs importantes pour les traitements complexes. Notamment, il surestime la dose hors-champ de 60 % à 80 % pour un traitement en RCMI [van den Heuvel et al., 2012]. Dans une étude visant à estimer la fiabilité des estimations de la dose au fœtus en radiothérapie, Kry et al. rapportent que le résultat obtenu avec Peridose diffère généralement de 30 % avec les mesures, mais des erreurs d'un facteur pouvant aller jusqu'à 3 ont été rapportées [Kry et al., 2007b]. D'après le rapport de l'AAPM, les modèles analytiques existants ne sont par ailleurs pas adaptés aux techniques avancées pour le calcul de la dose au fœtus [Kry et al., 2017].

Plus récemment, Sanchez et al. ont proposé un modèle paramétrique destiné au calcul de la dose périphérique pour toutes les techniques isocentriques. Les diffusions dans l'accélérateur sont modélisées par une source isotrope qui recrée ainsi la décroissance de la dose avec la distance à la source, et les fuites sont modélisées par un fond de dose constant [Sanchez et al., 2015]. La composante de diffusion dans le patient n'est cependant pas calculée, et le modèle est ainsi considéré valide seulement au-delà de 10 cm de la limite du champ, région dans laquelle l'incertitude peut tout de même atteindre 25 %.

Bilan

La prédiction de la dose périphérique est nécessaire en raison de la difficulté de sa mesure, et parce qu'une connaissance *a priori* pourrait permettre de l'inclure dans la planification du traitement. Les logiciels de planification de traitement ne sont cependant pas conçus pour ce calcul et privilégient naturellement la précision de la dose délivrée dans le volume tumoral, conduisant à des erreurs extrêmement importantes en dehors de celui-ci, voire à une absence totale d'estimation au-delà d'une certaine distance. Les outils dédiés entièrement à la dose périphérique donnent de bien meilleurs résultats, mais restent relativement imprécis. Ils sont, de plus, généralement adaptés à un nombre limité de modalités de traitement; les plus généraux sont capables d'estimer les doses pour certains traitements en RCMI, mais il n'existe à ce jour aucun outil de prédiction de la dose hors-champ pour les techniques plus complexes.

Une solution à ce problème pourrait être la simulation Monte-Carlo, qui présente l'avantage de pouvoir s'adapter à n'importe quel type de traitement, quelle que soit sa complexité, et grâce à laquelle la dose peut en principe être obtenue très précisément en tout point. L'estimation de la dose périphérique par Monte-Carlo présente toutefois ses propres difficultés, décrites dans la section suivante après une brève introduction de la méthode.

2.4 Estimation de la dose hors-champ par la méthode Monte Carlo

2.4.1 Origine et principe de la méthode

Généralités

Le terme Monte-Carlo désigne une classe de méthodes numériques caractérisée par l'utilisation de nombres aléatoires et donc du hasard pour la résolution d'un problème. Son développement débute à partir des années 1940, en premier lieu au Los Alamos National Laboratory. Elle est alors un moyen de simuler les processus de transport des neutrons, étape nécessaire au développement des premières armes atomiques. En 1949, Nicholas Metropolis et Stanislaw Ulam publient le premier article exposant la méthode sous la désignation de «méthode Monte-Carlo» [Metropolis and Ulam, 1949]. La simulation Monte-Carlo connaît ensuite un essor important avec l'augmentation de la puissance de calcul informatique, la méthode étant particulièrement bien adaptée à ce type de support.

Elle se base sur la construction d'un modèle probabiliste dans lequel l'espérance d'une variable aléatoire est aussi proche que possible de la grandeur (souvent physique) que l'on souhaite connaître. Un grand nombre d'échantillons indépendants de cette variable aléatoire sont obtenus, puis leur analyse statistique permet d'estimer l'espérance de la variable et ainsi la quantité recherchée. Plus le modèle est proche de la réalité, et plus l'espérance de la variable aléatoire étudiée est proche de la quantité physique d'intérêt.

Les tirages de la variable aléatoire, aussi appelés échantillonnages, sont réalisés à l'aide d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires [Hellekalek, 1998]. Leur principe est illustré ci-dessous sur la figure 23.

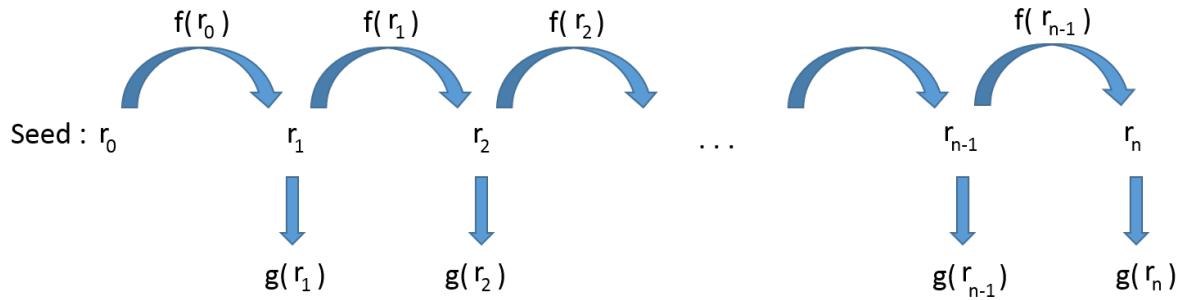


FIGURE 23 – Principe de fonctionnement d’un générateur de nombres pseudo-aléatoires. Les nombres $g(r_i)$ sont équivalents à des tirages selon une loi uniforme.

Les générateurs de nombres pseudo-aléatoires partent généralement d’un premier nombre quelconque r_0 appelé *seed* (ou «graine»), auquel une série d’opérations est appliquée (qui s’apparente ici à une fonction f) pour obtenir un nouveau nombre $r_1 = f(r_0)$. Ce dernier est lui-même utilisé comme point de départ pour le tirage du nombre suivant r_2 , et ainsi de suite. À chaque nombre r_i est appliquée une nouvelle fonction g , qui permet d’obtenir un nombre $g(r_i)$ compris entre 0 et 1. La série de nombres $g(r_i)$ ainsi obtenue possède une distribution équivalente à celle d’une variable aléatoire uniformément distribuée sur $[0; 1]$. Bien qu’il ne s’agisse pas d’une véritable variable aléatoire, puisque le résultat est déterminé par la *seed* choisie au départ, le comportement et les propriétés de la série de nombres obtenue sont cependant très proches de ceux qu’on pourrait obtenir via le hasard. En revanche, puisque le choix de la *seed* détermine la série de nombres obtenue, celle-ci est aisément reproductible. Lorsqu’ils sont utilisés pour la méthode Monte-Carlo, il est important de sélectionner non seulement des générateurs rapides (qui demandent peu d’opérations pour calculer $f(r_i)$ et $g(r_i)$), mais également possédant de bonnes propriétés statistiques.

Ces générateurs, qui réalisent des tirages d’une variable aléatoire simple, uniformément distribuée sur $[0; 1]$, sont à la base de l’échantillonnage de variables aléatoires plus complexes.

La méthode Monte-Carlo en radiothérapie

Dans le cas de la radiothérapie, la variable aléatoire étudiée est généralement une dose déposée dans une région spécifique, par exemple un ou plusieurs organes, par particule émise par l’accélérateur. Le modèle comprend la représentation de l’accélérateur, du patient, éventuellement d’autres éléments pertinents au calcul de la dose, ainsi que l’ensemble des lois physiques qui sous-tendent le transport et les interactions des particules. Un échantillon de la variable d’intérêt représente la dose déposée au cours de l’histoire d’une particule quelconque émise par l’accélérateur, durant laquelle chaque interaction est échantillonnée à l’aide des lois physiques connues pour reproduire au mieux le résultat des phénomènes réels. On parle alors généralement de simulations Monte-Carlo, puisque le tirage de la variable aléatoire se fait en simulant la réalité. Si le modèle est bien construit, la moyenne des doses ainsi obtenues par simulation devrait converger vers la dose moyenne réellement délivrée à mesure que des tirages sont réalisés. Une description plus détaillée du processus de transport des particules par Monte-Carlo est donnée dans la partie dédiée en 3.3.

La difficulté de cette approche tient au fait que le suivi d’un très grand nombre de particules est nécessaire pour garantir une faible incertitude statistique sur le résultat. En

effet, plus grand est le nombre de tirages effectués, et plus l'estimation de l'espérance est fiable. Or, chaque histoire comprend elle-même de nombreuses interactions et de nombreux échantillonnages intermédiaires, qui demandent chacun un inévitable temps de calcul. Cette propriété donne à la méthode Monte-Carlo la réputation d'être très coûteuse en temps. Malgré cela, elle reste une référence et est reconnue comme étant la plus précise pour les applications de physique médicale [Rogers, 2006] et de radiothérapie [Verhaegen and Seuntjens, 2003]. La section suivante présente notamment quelques codes de simulation Monte-Carlo couramment utilisés en radiothérapie.

2.4.2 Les codes Monte-Carlo en physique médicale

De nombreux codes de simulation Monte-Carlo ont été développés depuis l'élaboration de la méthode, et sont aujourd'hui utilisés couramment pour de nombreuses applications en radiothérapie. Cette partie en présente, ci-dessous, quelques exemples.

ETTRAN

Le code ETRAN (*Electron TRANsport*) a été développé par le *National Institute of Standards and Technologies* des États-Unis [Seltzer, 1991]. Il permet la simulation du transport des photons et des électrons [Seltzer, 1995]. Il s'agit de l'un des codes pionniers dans le transport de ces particules, et qui a ainsi largement contribué à l'élaboration d'autres codes par la suite.

EGSnrc

EGSnrc (*Electron Gamma Showers*) [Kawrakow, 2000] est développé au *National Research Council* (NRC) au Canada et a été publié en 2000. Il est dédié à la physique médicale, et permet également la simulation des photons et des électrons. Il est aujourd'hui l'un des codes les plus utilisés en radiothérapie.

MCNPX

Le code MCNP (*Monte-Carlo N-Particle Transport*) a débuté son développement au *Los Alamos National Laboratory* dans les années 1970, puis a été publié en 1983. Capable de simuler le transport des neutrons et des photons, il a par la suite donné naissance à MCNPX (*Monte-Carlo N-Particle Transport eXtended*) [D.B. Pelowitz, 2011] en 1994. Ce dernier peut simuler les interactions de 34 particules dont les électrons nécessaires aux applications médicales.

Geant4 et GATE

Développé par le CERN pour la physique des hautes énergies, Geant4 (*GEometry And Tracking*) [Agostinelli et al., 2003] a été diffusé en 2001. Le programme GATE (*Geant4 Application for Tomographic Emission*), spécialisé dans les applications médicales, a ensuite été développé à partir de Geant4. Il a été publié en 2004 [Jan et al., 2004].

PENELOPE

Le développement de PENELOPE (*Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons*) a débuté dans les années 1990 à l'*Universitat de Barcelona* [Salvat et al., 1996]. Il simule le transport des photons, des électrons et des positons. Il est aujourd'hui l'un des codes les plus utilisés en physique médicale et est considéré comme une référence pour les applications de dosimétrie.

2.4.3 Problématique liée à la dose hors-champ

Temps de calcul

Une simulation Monte-Carlo permet l'estimation d'une espérance via le calcul d'une dose moyenne sur de nombreux échantillons ou histoires de particules primaires (il s'agit ici d'un électron émis par l'accélérateur). Bien qu'elle converge vers l'espérance recherchée à mesure que des échantillons sont tirés, cette moyenne est elle-même une variable aléatoire : le résultat sera toujours différent d'une simulation à l'autre. Elle possède une certaine variance, qui est fonction du nombre d'échantillons utilisés, et qui dénote la variabilité que l'on peut attendre sur les différentes estimations réalisées au cours de différentes simulations. Elle établit ainsi, par le biais d'une intertitude statistique, le niveau de confiance que l'on peut avoir dans le résultat obtenu.

La variance du résultat de la simulation (moyenne des doses déposées pour toutes les histoires simulées) est proportionnelle à la variance de la variable aléatoire échantillonnée (dose déposée pour une histoire). Or, dans le cas des régions hors-champ, où seules quelques particules interagissent par rapport à la totalité des particules simulées, la variance de la dose déposée pour une histoire peut être très élevée. Les doses déposées présentent donc d'énormes écarts d'une histoire à l'autre, étant nulles pour la plupart des échantillons et non-nulles pour seulement un petit nombre d'entre eux, et le résultat obtenu est peu fiable. Cet effet est illustré sur la figure 24 ci-dessous, présentant un profil de dose estimé dans une cuve d'eau, le long d'un axe perpendiculaire au faisceau.

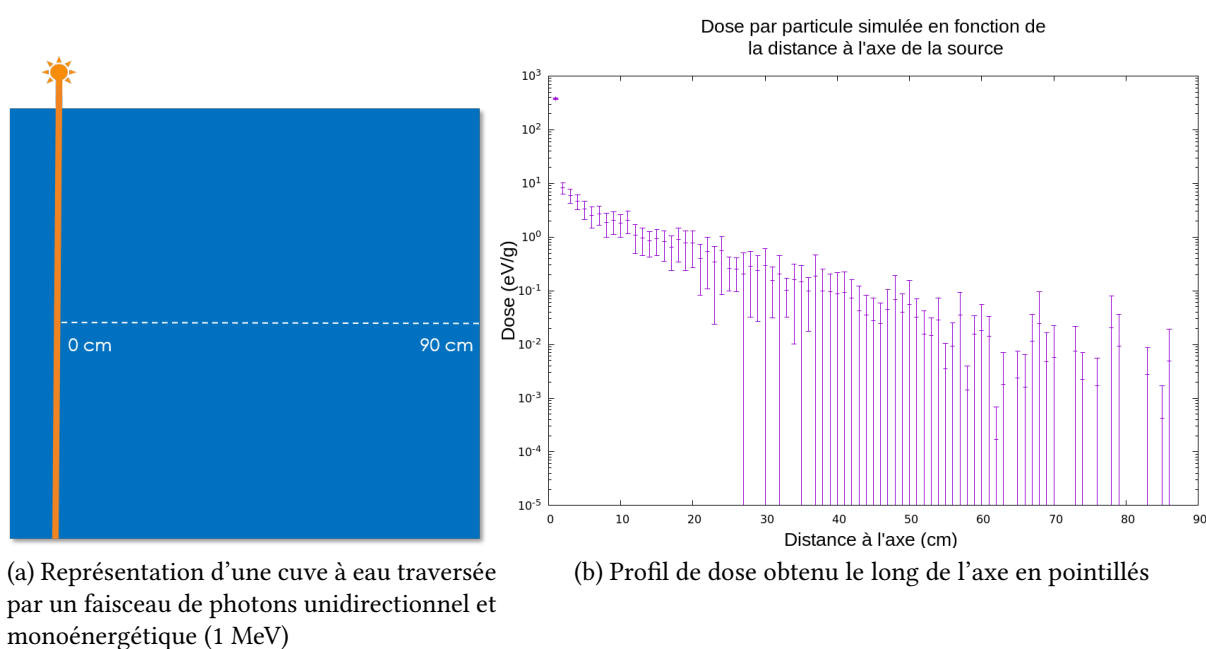


FIGURE 24 – Illustration de la problématique de la dose hors-champ : le calcul du profil dans une cuve à eau, représentée en (a), montre l'augmentation rapide de l'incertitude sur le résultat (b) à mesure que l'on s'éloigne du faisceau.

Dans ce cas, le nombre de particules déposant de l'énergie décroît de manière exponentielle avec la distance au faisceau. Il en résulte une augmentation très rapide de l'incertitude, à

tel point qu'il devient difficile de donner une estimation de la dose au-delà de quelques centimètres de l'axe du faisceau.

Bien que la variance de la variable échantillonnée ne varie pas, l'incertitude sur l'estimation, elle, décroît avec le nombre d'histoires simulées (plus de détails sont donnés dans la partie dédiée en 3.2.2). Il est alors possible d'obtenir un résultat exploitable en augmentant le nombre de particules suivies, mais le temps de calcul nécessaire peut alors s'avérer être bien trop élevé, en particulier pour une utilisation clinique. Il s'agit de l'une des barrières principales à l'utilisation de la méthode Monte-Carlo pour le calcul de la dose hors-champ.

Modélisation des conditions d'irradiation

La seconde difficulté liée à la dose hors-champ tient dans la constitution du modèle. S'il ne reproduit pas correctement les différentes sources de diffusion contribuant à la dose hors-champ, la dose estimée peut converger vers une valeur très différente de celle recherchée. Peu importe le temps de calcul, celle-ci est alors impossible à connaître.

Nous avons vu en 2.2.1 que le type d'accélérateur utilisé influe fortement sur la dose hors-champ. Son estimation demande une modélisation précise de la tête de l'appareil, incluant les composants internes mais également le blindage [Joosten *et al.*, 2011], pour prendre en compte correctement à la fois les fuites, les diffusions, et les électrons de contamination [Kry *et al.*, 2017]. Toutefois, il est souvent impossible de connaître parfaitement tous les composants de la machine utilisée. Une modélisation fidèle est, de plus, coûteuse en temps de calcul : plus la géométrie de la tête de l'accélérateur est complexe, et plus les particules doivent y être suivies longtemps.

Les plans de traitement complexes sont également largement plus difficiles à modéliser. Une majorité d'études des doses hors-champ par simulation se contente ainsi de faisceaux fixes et de plans simples, faute de pouvoir modéliser des traitements avec modulation d'intensité et plusieurs faisceaux. Généralement, les études consistent à développer un modèle d'accélérateur suffisamment précis pour déterminer les doses hors-champ dans des cas simples. Notamment, en 2006, S. Kry *et al* développent un modèle d'accélérateur Varian à 6 MeV pour le calcul de la dose hors-champ [Kry *et al.*, 2006], puis, en 2007, ils l'étendent à une énergie de 18 MeV [Kry *et al.*, 2007c]. De même, en 2009, B. Bednarz *et al* développent des modèles d'accélérateurs médicaux Varian destinés au calcul de la dose hors-champ pour des énergies de 6 et 18 MeV [Bednarz and Xu, 2009]. Toujours dans le même but, en 2019, J. Colnot *et al* élaborent un modèle Monte-Carlo d'une machine Cyberknife® [Colnot *et al.*, 2019].

2.5 Conclusion

De précédents travaux ont montré trois sources distinctes de rayonnement secondaire, qui irradient les régions saines du patient lors d'un traitement malgré la collimation du faisceau. En raison des caractéristiques différentes de chaque composante de ce rayonnement, la variation spatiale de la dose déposée peut être complexe. À proximité du champ, elle provient principalement des diffusions dans le patient et elle est donc très liée à la taille du champ. À distance, en revanche, les diffusions et les fuites dans l'accélérateur prennent de

l'importance par rapport à cette première source, et la dose varie plus lentement. Elle reste malgré cela très liée aux conditions d'irradiation, et en particulier la taille du champ.

Une irradiation peut se faire dans des conditions très variées, selon la technique utilisée : le champ, notamment, peut être plus ou moins grand et de forme complexe lors de l'utilisation d'un MLC, et le temps d'irradiation (lié au nombre d'unités moniteur nécessaires) peut grandement varier d'une technique à l'autre. Ainsi, la dose périphérique peut également présenter une ample gamme de valeurs : en particulier, la RCMI et les techniques basées sur cette dernière augmentent considérablement la dose périphérique. Cette hausse est principalement due au temps plus élevé nécessaire à l'irradiation de la tumeur, laissant les fuites irradier plus longtemps à distance. Elle est également liée à l'augmentation du volume touché, elle-même due au nombre de faisceaux plus important.

L'augmentation de la dose périphérique entraîne un risque d'effets secondaires largement plus élevé pour la plupart des techniques avancées que pour les techniques conventionnelles, en particulier pour la RCMI. Puisqu'elles tendent à être de plus en plus utilisées, il devient primordial de connaître la dose hors-champ délivrée au cours d'un traitement. Cette dose peut être connue par des mesures, mais le choix du détecteur est délicat et peut nécessiter d'avoir déjà des connaissances sur la composition du rayonnement mesuré pour étalonner le dosimètre. Sa mesure est ainsi difficile (voire impossible) en clinique, et n'est donc pas pratiquée.

Au niveau de son estimation par calcul, il ressort de l'ensemble des études que les TPS ne sont pas fiables pour le calcul des doses hors-champ, donnant souvent des résultats erronés dès les limites du champ, et étant limités à quelques centimètres au-delà. D'autres outils, élaborés à partir de mesures de la dose périphérique, sont capables de l'estimer dans des conditions simples et même parfois en RCMI, mais peuvent aboutir à des erreurs importantes. Ils ne sont, de plus, pas adaptés aux traitements plus complexes.

Cette dose peut, finalement, être estimée par le calcul à l'aide de la méthode Monte-Carlo. Bien qu'elle soit aujourd'hui largement utilisée et validée dans le domaine médical, elle est cependant limitée à la fois par la précision de la modélisation de l'accélérateur et par le temps de calcul nécessaire, qui devient de plus en plus important à mesure que l'on s'éloigne du champ d'irradiation. L'objectif de ce travail de thèse est de contribuer à la résolution de ce problème de lenteur du calcul en gardant un résultat exploitable. Il consiste, pour cela, à choisir puis étudier une méthode de réduction de variance destinée à accélérer les estimations en dehors du champ, pour ensuite l'implémenter dans un code de simulation. La validité et l'apport de ces techniques sont directement liés à la manière dont la méthode Monte-Carlo permet l'estimation d'une grandeur physique par une succession de tirages aléatoires. Le chapitre suivant donne ainsi quelques éléments clés nécessaires à sa compréhension, avant de présenter le principe des méthodes de réduction de variance.

3 Estimations par la méthode Monte Carlo

3.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à une description plus détaillée de la méthode Monte-Carlo appliquée au transport de particules, qui est au coeur de ce travail. La première partie concerne la définition des différents concepts qui seront utilisés par la suite : ce qu'est l'espérance d'une variable aléatoire, comment elle est approchée par un estimateur, comment sa variance est elle-même estimée, et comment la notion d'efficacité permet d'évaluer la qualité d'une simulation. Ensuite, la seconde partie a pour but de montrer pourquoi le transport d'une particule par pas successifs pour calculer l'énergie déposée par celle-ci équivaut à l'échantillonnage d'une variable aléatoire. Cette étape est essentielle pour la formalisation de la méthode de réduction de variance qui sera implémentée, car celle-ci s'apparente à une modification du transport des particules et donc à un changement de variable aléatoire. La dernière partie met en avant le principe des méthodes de réduction de variance, d'abord de manière générale, puis détaille certaines méthodes couramment utilisées ou utiles pour la construction de nouvelles méthodes composites.

3.2 Définition des concepts utilisés

3.2.1 Estimation de l'espérance d'une variable aléatoire

On suppose une variable aléatoire notée X , de densité de probabilité $f(x)$ et définie sur un ensemble E . Si g est une fonction quelconque, alors $Y = g(X)$ est également une variable aléatoire dont l'espérance est donnée par [Ross, 2019] :

$$\mathbb{E}(Y) = \int_E g(x)f(x)dx \quad (1)$$

Si le modèle que l'on utilise est construit de manière à ce que l'espérance de Y soit égale à la quantité physique que l'on cherche à évaluer ou permette son calcul, alors l'analyse statistique d'échantillons indépendants de Y permet d'estimer cette quantité physique par l'estimation de son espérance.

Cette estimation se fait via le calcul d'une quantité nommée estimateur. Il s'agit d'une fonction d'un ensemble de N échantillons de la variable dont on souhaite estimer une propriété. Plus précisément, un estimateur aura ici la forme $h(Y_1, \dots, Y_N)$ où les variables Y_i sont indépendantes et suivent toutes la loi de probabilité de Y . Étant une fonction de variables aléatoires, l'estimateur est également une variable aléatoire dont une réalisation $h(y_1, \dots, y_N)$ est appelée estimation. Le calcul d'un tel estimateur permet d'obtenir une valeur approchée d'une propriété intrinsèque à une variable aléatoire telle que, par exemple, son espérance. L'estimateur généralement utilisé pour l'espérance d'une variable quelconque Y est la moyenne arithmétique :

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \quad (2)$$

Cet estimateur est non biaisé, ce qui signifie qu'il vérifie [McGrath and Irving, 1973] :

$$\mathbb{E}(\bar{Y}) = \mathbb{E}(Y) \quad (3)$$

Tous les estimateurs ne possèdent pas cette propriété, mais elle est généralement recherchée puisqu'elle indique que les estimations n'auront pas tendance à surestimer ou à sous-estimer $\mathbb{E}(Y)$. Avec l'estimateur donné ci-dessus, une estimation de l'espérance de Y est :

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (4)$$

où les y_i sont les N échantillons de Y . L'obtention d'un échantillon (ou d'une réalisation) de Y en suivant sa loi de probabilité sera appelé ici échantillonnage. Dans ce cas, il consiste à tirer X selon $f(x)$ puis à calculer la valeur $Y = g(X)$. Les nombreuses méthodes d'échantillonnage existantes permettent d'obtenir un tirage suivant la plupart des lois de probabilité. Certaines d'entre elles, utilisées dans le transport de particules, sont notamment décrites par I. Lux dans *Monte Carlo Transport Methods : Neutron and Photon Calculations* [Lux and Koblinger, 1991]. Certaines sont également détaillées par F. Salvat dans la documentation du code PENELOPE [Salvat et al., 2014]. Le détail de ces méthodes ne sera cependant pas traité ici.

3.2.2 Variance de l'estimateur d'espérance

L'estimateur \bar{Y} étant lui-même une variable aléatoire, il possède une certaine variance qui décrit sa tendance à fluctuer d'une réalisation à l'autre et est liée à l'incertitude statistique sur l'estimation. La variance, que l'on notera σ^2 (il s'agit du carré de l'écart-type noté σ), pour une variable aléatoire $Y = g(X)$, est définie comme :

$$\sigma^2(Y) = \mathbb{E}[(Y - \mathbb{E}(Y))^2] \quad (5)$$

$$= \mathbb{E}(Y^2) - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (6)$$

$$= \int g(x)^2 f(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (7)$$

L'estimation de l'espérance étant, pour rappel, une moyenne sur N échantillons, la variance de l'estimateur est alors :

$$\sigma^2(\bar{Y}) = \sigma^2 \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \right) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sigma^2(Y_i) = \frac{1}{N} \sigma^2(Y) \quad (8)$$

Où, pour rappel, les variables aléatoires Y_i sont indépendantes et identiquement distribuées. Si la variance de l'estimateur est faible, alors il est plus probable que l'estimation soit proche de la valeur recherchée. Elle est d'autant plus élevée que la variance de la variable étudiée Y est grande, mais elle diminue à mesure que l'on augmente le nombre d'échantillons N . L'incertitude statistique sur l'estimation d'une quantité physique est proportionnelle à l'écart-type et varie donc quant à elle comme $1/\sqrt{N}$. C'est pour cette raison que la méthode Monte-Carlo est généralement très coûteuse en temps de calcul si on souhaite obtenir une précision statistique élevée, en particulier lorsque la variance de Y est importante comme dans un calcul de dose hors-champ : un gain d'un facteur 10 sur l'incertitude nécessite un nombre d'échantillons 100 fois plus grand.

De même que pour l'espérance, la variance de Y est inconnue et peut seulement être estimée. Un estimateur sans biais est :

$$\overline{\sigma^2}(Y) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 \quad (9)$$

Enfin, l'incertitude donnée sur le résultat d'une simulation Monte-Carlo est généralement proportionnelle à l'estimation de l'écart-type :

$$\overline{\sigma}(\overline{Y}) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i^2 - \overline{Y}^2 \right)} \quad (10)$$

Dans la majorité des codes de simulation Monte-Carlo, l'incertitude donnée sur le résultat vaut $k\overline{\sigma}(\overline{Y})$ avec $k = 1, 2$ ou 3 .

3.2.3 Efficacité d'une simulation

Si la variance informe sur la fiabilité du résultat, en pratique, elle n'est pas suffisante pour juger de la rapidité d'une estimation par Monte-Carlo. Elle peut en effet être arbitrairement faible, pour peu que l'utilisateur investisse assez de temps pour tirer un nombre d'échantillons suffisamment grand. Puisque chaque échantillonnage de Y nécessite un certain temps de calcul, une diminution de la variance se fait au prix d'une augmentation du temps de simulation. Le critère de la variance seul n'est alors pas suffisant et il devient nécessaire de connaître le temps investi pour parvenir à cette variance. On introduit alors la notion d'efficacité ϵ définie comme :

$$\epsilon = \frac{1}{\sigma^2 t} \quad (11)$$

où t est le temps de calcul nécessaire pour atteindre une variance égale à σ^2 (où σ dénote ici l'estimation de l'écart-type, donnée ci-dessus en (10)). Contrairement à la variance, cette quantité peut être considérée comme constante pour une simulation donnée [Bielajew and Rogers, 1988]. Si N est le nombre d'histoires simulées, la variance σ^2 décroît en fonction de $1/N$. Puisque le temps de simulation t est, en moyenne, directement proportionnel à N , le produit de ces deux valeurs doit tendre vers une constante.

Si l'efficacité est multipliée par un facteur n , alors soit le temps nécessaire pour arriver à une même variance est réduit d'un facteur n , soit la variance est réduite d'un facteur n pour un même temps de simulation. Pour optimiser une simulation, il est alors naturel de chercher à maximiser l'efficacité.

3.3 Transport de particules par Monte-Carlo

3.3.1 Constitution d'une histoire

Les différentes estimations effectuées par Monte-Carlo reposent sur la capacité à produire des échantillons de la variable aléatoire d'intérêt, qui respectent donc sa loi de probabilité. Lorsque l'on cherche à connaître une quantité physique telle qu'une dose déposée pendant un traitement, la simulation a généralement pour objectif d'estimer l'espérance de la variable aléatoire «*Y = dose déposée au cours de l'histoire d'une particule émise par la source*» (éventuellement dans une région limitée). Le processus d'estimation est illustré ci-dessous sur la figure 25.

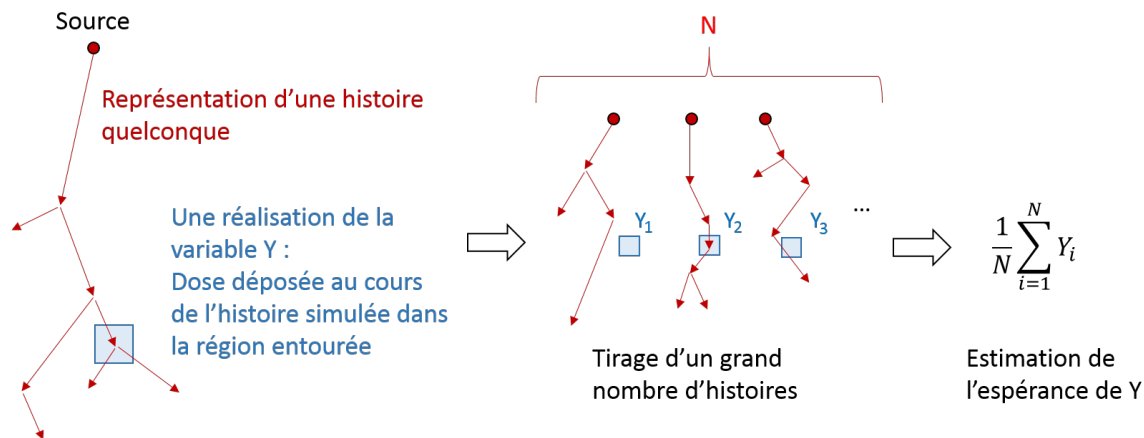


FIGURE 25 – Illustration de la méthode d'estimation de la dose déposée pour une particule source. La trajectoire des particules permet de visualiser les étapes d'obtention d'une réalisation de cette variable.

Une réalisation de cette variable consiste à simuler l'émission et l'histoire d'une particule dans une géométrie de calcul donnée, représentative du milieu physique réel, et de calculer la dose déposée au cours de cette histoire. Après l'échantillonnage d'un grand nombre d'histoires, une estimation de l'espérance de Y peut être faite. La connaissance de cette valeur permet ensuite de remonter à une estimation de la dose réelle grâce aux paramètres d'irradiation.

La trajectoire d'une particule débute par son émission par une source, puis est composée d'une série de déplacements entrecoupés d'interactions qui peuvent modifier son énergie et sa direction. La particule est suivie de sa création jusqu'à sa disparition par sortie du milieu de calcul ou par absorption dans un matériau, où elle dépose alors localement son énergie restante. Les interactions et les déplacements entre celles-ci sont échantillonnés un par un, dans l'ordre de leur survenue.

Les trajectoires des particules secondaires créées par les interactions de la particule primaire avec le milieu le long de son parcours font également partie de la variable d'intérêt. Elles sont aussi simulées, généralement après la fin de la trajectoire de la particule primaire. Le tirage de la variable d'intérêt se termine lorsque toutes les particules créées ont quitté le milieu de calcul ou ont été absorbées, et l'histoire d'une particule comprend ainsi à la fois la trajectoire de la particule primaire et celles des particules secondaires.

L'échantillonnage réalisé est une succession de nombreux échantillonnages de variables aléatoires intermédiaires représentant tous les processus physiques stochastiques rencontrés : choix des caractéristiques et du point d'émission, distance parcourue par la particule avant d'interagir, type d'interaction rencontrée, déviation de la particule due à l'interaction, perte d'énergie... Chacun de ces échantillonnages respecte la densité de probabilité du processus en question, connue ou approchée à partir des lois physiques qui lui sont relatives.

La loi de probabilité que suit un processus physique donné dépend uniquement de l'état actuel de la particule (caractérisé par son énergie, sa position et sa direction). La réalisation de ce processus, dont l'issue est déterminée par échantillonnage, modifie l'état de la particule. Ce nouvel état détermine alors la loi de probabilité du processus suivant, et ainsi de suite. Ce procédé, qui s'apparente ainsi à une chaîne de Markov, est illustré ci-dessous sur la figure 26, dans un exemple où le nombre de réalisations est limité.

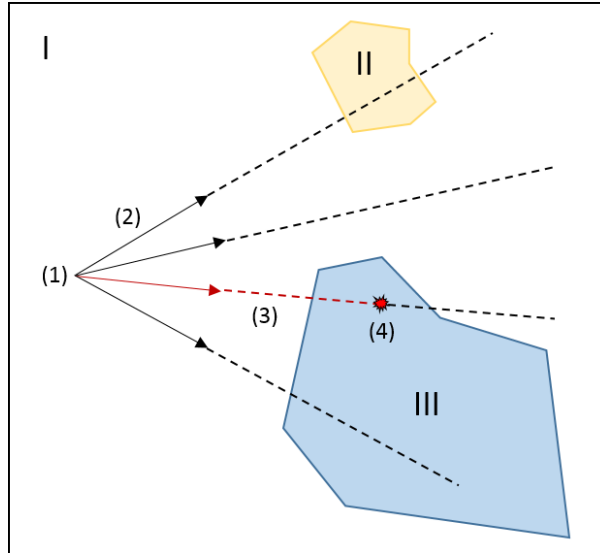


FIGURE 26 – Illustration dans un cas simplifié du processus markovien de transport d’une particule par échantillonnages successifs.

Dans le cas ci-dessus, un photon se déplace dans le milieu *I* et subit une diffusion Rayleigh en (1). Cette interaction modifie aléatoirement sa direction selon une loi qui dépend de son énergie, et donc de son état en (1). Parmi les directions possibles (2), la troisième possibilité est obtenue. Le second processus aléatoire est le choix du pas, dont la loi dépend de l’énergie, de la position, et de la direction du photon et donc du résultat de l’échantillonnage (2). En effet, selon la direction obtenue, il est possible que la particule soit dirigée vers les milieux *II* ou *III*, ou bien reste dans le milieu *I*. Dans cet exemple, le pas obtenu fait interagir le photon dans le milieu *III*. L’échantillonnage (4) correspond ensuite au choix de l’interaction à réaliser. La probabilité relative de chaque interaction dépend du milieu dans lequel le photon se trouve. À nouveau donc, la loi à échantillonner dépend du résultat obtenu en (3) puisque le photon aurait pu s’arrêter avant le milieu *III* ou bien le traverser et rester dans le milieu *I*.

Si on remonte la chaîne d’évènements jusqu’à l’émission de la particule, on constate que la totalité de son histoire est déterminée uniquement par le modèle et les réalisations des différents processus aléatoires échantillonnés⁶. Chaque processus est en fait une variable aléatoire conditionnée par le résultat de la variable précédente, elle-même conditionnée par la précédente, et ainsi de suite jusqu’à la toute première variable échantillonnée. Si X_i représente le $i^{\text{ème}}$ processus échantillonné, alors celui-ci est conditionné par les réalisations de l’ensemble des $i - 1$ variables précédentes. On peut noter sa densité de probabilité sous la forme d’une densité conditionnelle $f(x_i | X_{i-1} = x_{i-1}, \dots, X_1 = x_1)$ ⁷. De même, le processus $i - 1$ suit une densité de probabilité $f(x_{i-1} | X_{i-2} = x_{i-2}, \dots, X_1 = x_1)$, et ainsi de suite jusqu’à X_1 .

De manière générale, la densité de probabilité conditionnelle d’une variable X_2 sachant que l’évènement $X_1 = x_1$ est réalisé est définie par la relation :

$$f(x_2 | X_1 = x_1) f(x_1) = f(x_1, x_2) \quad (12)$$

6. L’état initial de la particule peut lui-même être une variable aléatoire.

7. Le caractère markovien de ce processus implique par ailleurs que cette loi est simplement égale à $f(x_i | X_{i-1} = x_{i-1})$

avec $f(x_1, x_2)$ la densité jointe des variables X_1 et X_2 et

$$f(x_1) = \int f(x_1, x_2) dx_2 \quad (13)$$

L'échantillonnage de X_1 selon $f(x_1)$ puis celui de $X_2|X_1 = x_1$ selon $f(x_2|X_1 = x_1)$ permet ainsi d'obtenir un échantillon distribué selon $f(x_1, x_2)$. Or, on a ici :

$$f(X_i|X_{i-1} = x_{i-1}, \dots, X_1 = x_1) \dots f(x_2|X_1 = x_1)f(x_1) = f(x_1, \dots, x_i) \quad (14)$$

En conséquence, les échantillonnages successifs réalisés pour le transport selon $f(x_1)$, puis $f(x_2|X_1 = x_1)$ etc. fournissent un échantillon distribué selon la densité de probabilité jointe $f(x_1, \dots, x_i)$ des variables X_1 à X_i . Si on fait l'hypothèse que l'histoire d'une particule comprend n processus aléatoires, alors la variable aléatoire Y , qui dépend de la totalité de l'histoire, est une fonction des variables X_1 à X_n : l'histoire est en effet entièrement décrite par les réalisations successives des processus aléatoires rencontrés. Elle peut alors s'écrire $Y = g(X_1, \dots, X_n)$ et son espérance est :

$$\mathbb{E}(Y) = \int f(x_1, \dots, x_n)g(x_1, \dots, x_n)dx_1 \dots dx_n \quad (15)$$

Un unique échantillonnage de cette variable, liée à l'histoire complète d'une particule, requiert potentiellement l'échantillonnage d'un très grand nombre de variables aléatoires intermédiaires. De plus, l'incertitude sur l'estimation diminue en fonction de la racine du nombre d'échantillons obtenus. Dans de nombreux cas, la variance de la variable échantillonnée est importante et obtenir une incertitude statistique satisfaisante demande un temps considérable. Pour atténuer ce problème, des méthodes d'échantillonnage ont été développées avec pour objectif d'améliorer l'efficacité du calcul. La partie suivante présente de manière générale ces méthodes, dites de réduction de variance, avant d'analyser quelques exemples utiles.

3.4 Méthodes de réduction de variance

3.4.1 Principe général

Une technique de réduction de variance est une modification de la variable aléatoire échantillonnée, qui ne suit alors plus les lois de probabilités physiques. On parle alors de simulation ou échantillonnage non-analogue, à l'opposé de la simulation analogue où l'on suit le plus fidèlement possible les lois physiques. La réduction de variance doit respecter deux critères :

- Puisque l'on souhaite obtenir le même résultat qu'en simulation analogue, l'estimateur utilisé ne doit pas être biaisé par les modifications introduites (autrement dit, le calcul converge vers le même résultat),
- La technique doit permettre, lorsqu'elle est bien employée, d'améliorer l'efficacité du calcul pour la quantité d'intérêt. Elle peut éventuellement avoir pour conséquence de réduire l'efficacité pour les autres quantités.

L'augmentation d'efficacité peut avoir deux origines. Si la variance de la variable non-analogue est plus faible que celle de la variable analogue mais que le temps d'échantillonnage est comparable, alors l'efficacité sera améliorée. Dans ce cas toutefois, la diminution de la

variance se fait souvent au prix d'un temps de calcul plus élevé. L'efficacité sera tout de même améliorée tant que le gain sur la variance compense la perte de temps.

À l'inverse, si l'échantillonnage non-analogue est plus rapide mais que la variance est similaire, l'efficacité sera aussi améliorée. À nouveau, le gain de temps est souvent obtenu au prix d'une augmentation de la variance et l'efficacité est augmentée à condition que le gain de temps compense cette augmentation. On notera que, dans ce second cas, les techniques dites de réduction de variance augmentent au contraire cette dernière. On parle généralement de réduction de variance dans le sens où, pour un même temps de simulation, la variance est réduite. Il s'agit en fait toujours d'une augmentation d'efficacité [Bielajew and Rogers, 1988].

Très souvent, la variable aléatoire non-analogue comprend un facteur multiplicatif nécessaire afin d'éviter d'introduire un biais dans l'estimateur utilisé. Appliquée au transport de particules, cette pondération prend généralement la forme d'un poids porté par la particule après un échantillonnage selon une loi non-analogue. Chaque contribution à une estimation faite par la suite par cette particule est pondérée par cette valeur. Il ne s'agit pas de la seule possibilité pour tenir compte de ce facteur, mais elle présente de nombreux avantages pratiques et est largement adoptée dans les codes de simulation Monte-Carlo.

3.4.2 Splitting

On suppose à nouveau que l'on cherche à estimer l'espérance d'une variable quelconque $Y = g(X)$. La variable X peut représenter n'importe quel processus au cours de l'histoire de la particule, conditionné par l'ensemble des événements passés. Les techniques pouvant s'appliquer à cette variable peuvent ainsi s'appliquer à n'importe quel moment dans le transport d'une particule.

La technique du splitting [McGrath and Irving, 1973, Kahn, 1955] consiste à copier une particule en n nouvelles particules identiques mais de poids réduits. Ces poids doivent être choisis de manière à ce que leur somme soit égale à l'unité, mais on donne généralement un poids de $1/n$ à toutes les copies. Les particules sont ensuite suivies l'une après l'autre et la somme de leurs contributions constitue un échantillon de la variable non-analogue.

Si $Y = g(X)$ est la variable analogue, alors le splitting revient à la remplacer par la variable Y_S telle que :

$$Y_S = a_1g(X_1) + a_2g(X_2) + \dots + a_n g(X_n) = \sum_{j=1}^n a_j g(X_j) \quad (16)$$

où les variables X_j suivent la même densité de probabilité $f(x)$ que la variable X , et avec

$$\sum_{j=1}^n a_j = 1 \quad (17)$$

On vérifie bien :

$$\mathbb{E}(Y_S) = \mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^n a_j g(X_j)\right) \quad (18)$$

$$= \sum_{j=1}^n a_j \mathbb{E}(g(X_j)) \quad (19)$$

$$= \sum_{j=1}^n a_j \mathbb{E}(Y) \quad (20)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \sum_{j=1}^n a_j \quad (21)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \quad (22)$$

De même que pour la variable analogue, cette espérance peut être estimée sans biais par une moyenne sur N échantillons. Chaque échantillon de Y_S est cependant ici constitué de n échantillons pondérés de Y :

$$\overline{Y}_S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^n a_j g(x_{i,j}) \right) \quad (23)$$

La variance de cette variable est :

$$\sigma^2(Y_S) = \sigma^2\left(\sum_{j=1}^n a_j g(X_j)\right) \quad (24)$$

$$= \sum_{j=1}^n \sigma^2(a_j g(X_j)) \quad (25)$$

$$= \sum_{j=1}^n a_j^2 \sigma^2(g(X_j)) \quad (26)$$

$$= \sigma^2(Y) \sum_{j=1}^n a_j^2 \quad (27)$$

Notamment, si tous les poids ont une valeur positive et sont inférieurs à 1, on a :

$$\sum_{j=1}^n a_j^2 < 1 \quad (28)$$

et donc

$$\sigma^2(Y_S) < \sigma^2(Y) \quad (29)$$

On notera que même si la variance est toujours inférieure à celle de la variable analogue, l'échantillonnage de Y_S requiert n échantillonnages de Y (soit le suivi de n particules) et donc un temps de calcul en moyenne n fois plus élevé. L'efficacité peut être améliorée si le splitting est utilisé en un point important de l'histoire de la particule pour l'estimation recherchée (par exemple, lorsque la particule s'approche d'une région d'intérêt) pour lequel le gain de variance

compense le temps supplémentaire. Pour un calcul de dose hors-champ, il est envisageable de l'utiliser par exemple lorsqu'une particule quitte le champ après avoir été diffusée dans le patient ou l'accélérateur.

Il est possible de montrer que la somme de l'équation (28) est minimale si les a_j sont identiques, d'où l'utilisation habituelle d'un poids de $1/n$ pour toutes les particules. Finalement, un estimateur non biaisé pour cette variance est :

$$\overline{\sigma^2}(Y_S) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^n a_{i,j} g(x_{i,j}) \right)^2 - \overline{Y_S}^2 \quad (30)$$

Il se calcule de la même manière que pour la variable analogue, à l'exception qu'une réalisation de Y_i est, à nouveau, une somme de n contributions.

3.4.3 Roulette Russe

La roulette russe [McGrath and Irving, 1973, Kahn, 1955], lorsqu'elle est appliquée à une particule, consiste d'abord à lui attribuer une probabilité de survie p . On tire alors un nombre aléatoire uniformément entre 0 et 1. Si ce nombre est inférieur à p , on considère que la particule survit à la roulette et son poids est augmenté d'un facteur $1/p$. Sinon, elle est «tuée», c'est-à-dire que son suivi est arrêté et elle ne contribue plus à aucune estimation.

Ce processus fait appel à deux variables aléatoires : la variable analogue $Y = g(X)$, et U qui suit une loi uniforme sur $[0; 1]$. On échantillonne la variable Y_R telle que :

$$Y_R = \frac{1}{p} g(X) \mathbb{1}_{[0,p[}(U) \quad (31)$$

Où $\mathbb{1}_{[0,p[}(U)$ est la fonction indicatrice de l'ensemble $[0, p[$. On a alors :

$$\mathbb{E}(Y_R) = \int \frac{1}{p} g(x) f(x) \mathbb{1}_{[0,p[}(u) dx du \quad (32)$$

$$= \frac{1}{p} \int \mathbb{1}_{[0,p[}(u) du \int g(x) f(x) dx \quad (33)$$

$$= \frac{1}{p} p \int g(x) f(x) dx \quad (34)$$

$$= \int g(x) f(x) dx \quad (35)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \quad (36)$$

Un estimateur non biaisé de $\mathbb{E}(Y_R)$ est :

$$\overline{Y_R} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{p} g(x_i) \mathbb{1}_{[0,p[}(u_i) \quad (37)$$

L'échantillonnage de Y_R consiste à réaliser des tirages des variables U et Y . La contribution de Y est pondérée par le facteur $\frac{1}{p}$, mais est nulle si u_i n'appartient pas à l'ensemble $[0, p[$. La

variance de cette variable est :

$$\sigma^2(Y_R) = \int \frac{1}{p^2} g(x)^2 f(x) \mathbb{1}_{[0,p[}(u) dx du - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (38)$$

$$= \frac{1}{p^2} \int \mathbb{1}_{[0,p[}(u) du \int g(x)^2 f(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (39)$$

$$= \frac{1}{p} \int g(x)^2 f(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (40)$$

$$= \frac{1}{p} \int g(x)^2 f(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 - \frac{1}{p} \mathbb{E}(Y)^2 + \frac{1}{p} \mathbb{E}(Y)^2 \quad (41)$$

$$= \frac{1}{p} \left[\int g(x)^2 f(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 \right] - \mathbb{E}(Y)^2 + \frac{1}{p} \mathbb{E}(Y)^2 \quad (42)$$

$$= \frac{1}{p} \sigma^2(Y) - \left(1 - \frac{1}{p}\right) \mathbb{E}(Y)^2 \quad (43)$$

Le facteur $1/p$ étant toujours supérieur à 1, la variance est toujours plus élevée que celle de la variable analogue lors de l'utilisation de la roulette. On l'utilise généralement lorsque les particules ont de faibles chances de contribuer à l'estimation recherchée, par exemple lorsqu'elles s'éloignent d'une zone d'intérêt. L'élimination d'une partie d'entre elles permet d'éviter de les suivre inutilement. Finalement, un estimateur non biaisé pour cette variance est :

$$\overline{\sigma^2}(Y_R) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{p} g(x_i) \mathbb{1}_{[0,p[}(u_i) \right)^2 - \overline{Y}_R^2 \quad (44)$$

Son calcul est similaire à celui de l'estimateur de la variance de Y , à l'exception de certaines contributions qui sont nulles.

3.4.4 Échantillonnage préférentiel

L'échantillonnage préférentiel (ou « *importance sampling* ») [McGrath and Irving, 1973, Kahn, 1955] consiste à remplacer l'échantillonnage de la variable analogue par celui d'une variable aléatoire de densité de probabilité choisie arbitrairement mais définie sur le même ensemble. L'échantillon obtenu est pondéré par le rapport des densités de probabilité analogue sur non-analogue. On pourra, par exemple, remplacer la densité de probabilité relative à l'énergie d'une particule lors de son émission par une autre qui favorise la production de particules d'énergies élevée si celles-ci sont intéressantes pour l'estimation recherchée.

Dans le cas de la variable $Y = g(X)$, on remplace l'échantillonnage de X par celui d'une variable X^* de densité de probabilité $f^*(x)$. L'échantillon $g(x_i)$ obtenu est pondéré par $\frac{f(x_i)}{f^*(x_i)}$. La variable non-analogue est ici Y^* telle que :

$$Y^* = g(X^*) \frac{f(X^*)}{f^*(X^*)} \quad (45)$$

L'espérance de Y^* est :

$$\mathbb{E}(Y^*) = \int g(x) \frac{f(x)}{f^*(x)} f^*(x) dx \quad (46)$$

$$= \int g(x) f(x) dx \quad (47)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \quad (48)$$

Un estimateur non biaisé de $\mathbb{E}(Y^*)$ est alors :

$$\bar{Y}^* = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \frac{f(x_i)}{f^*(x_i)} \quad (49)$$

Sa variance est :

$$\sigma^2(Y^*) = \int \left(g(x) \frac{f(x)}{f^*(x)} \right)^2 f^*(x) dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (50)$$

Un estimateur non biaisé pour la variance est :

$$\overline{\sigma^2}(Y^*) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(g(x_i) \frac{f(x_i)}{f^*(x_i)} \right)^2 - \bar{Y}^{*2} \quad (51)$$

Par rapport à la situation analogue, la différence de variance est :

$$\sigma^2(Y^*) - \sigma^2(Y) = \int \left(g(x) \frac{f(x)}{f^*(x)} \right)^2 f^*(x) dx - \int g(x)^2 f(x) dx \quad (52)$$

$$(53)$$

$$= \int g(x)^2 \frac{f(x)^2}{f^*(x)} dx - \int g(x)^2 f(x) dx \quad (54)$$

$$(55)$$

$$= \int g(x)^2 f(x) \left(\frac{f(x)}{f^*(x)} - 1 \right) dx \quad (56)$$

On notera que la condition pour que la variance soit réduite par cette technique est que l'intégrale ci-dessus soit négative. Or, il ne peut pas exister de densité de probabilité $f^*(x)$ telle que $\forall x, f^*(x) > f(x)$, qui garantirait cette condition. Le signe de l'intégrale, et donc l'effet de la technique sur la variance, dépend alors entièrement de la densité utilisée. Un bon choix de densité permettra soit de diminuer la variance de la variable d'intérêt, soit de gagner du temps si l'échantillonnage selon $f^*(x)$ est suffisamment rapide par rapport à la densité analogue. Le choix de $f^*(x)$ demande généralement une connaissance approfondie du problème.

3.4.5 Échantillonnage systématique

L'échantillonnage systématique (ou «*systematic sampling*») [Lux and Koblinger, 1991] consiste à diviser la variable aléatoire d'intérêt en la somme de multiples variables, chacune définie sur un sous-ensemble de son ensemble de définition initial, de sorte que les événements correspondant à chaque sous-ensemble doivent nécessairement se réaliser. Il peut être vu comme la succession de deux étapes que l'on appellera ici «partitionnement» et «conditionnement».

Partitionnement

Le partitionnement consiste à séparer les évènements possibles pour une variable aléatoire pour traiter les différents ensembles de réalisations de manière indépendante. La variable aléatoire non-analogue est une somme de variables qui sont définies chacune sur une partie de l'ensemble de définition de la variable analogue.

Pour donner un exemple, supposons que l'on souhaite réaliser l'échantillonnage de la distance d parcourue pendant le pas d'une particule dans un matériau après une interaction. Les valeurs possibles pour la distance parcourue d peuvent être séparées en deux sous-ensembles : $d < D$ et $d \geq D$, avec D une valeur quelconque. Si on souhaite partitionner cet évènement, la variable non-analogue est la somme de deux variables définies respectivement sur les ensembles $[0; D]$ et $]D; +\infty]$, et deux particules doivent alors être suivies. La première ne pourra pas dépasser la distance D , tandis que la seconde ne pourra pas parcourir une distance inférieure à D .

On traite ci-dessous du cas général où les évènements possibles pour la variable X sont séparés en deux ensembles A_1 et A_2 qui partitionnent son ensemble de définition E . Ceci est toutefois généralisable pour n'importe quel nombre de sous-ensembles disjoints de E . La variable non-analogue échantillonnée est Y_p telle que :

$$Y_p = g(X)\mathbb{1}_{A_1}(X) + g(X')\mathbb{1}_{A_2}(X') \quad (57)$$

Où $\mathbb{1}_{A_i}(x)$ est la fonction indicatrice de l'ensemble A_i . Les variables X et X' sont définies toutes les deux par la même densité de probabilité $f(x)$. On peut alors vérifier :

$$\mathbb{E}(Y_p) = \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_1}(x)dx + \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_2}(x)dx \quad (58)$$

$$= \int g(x)f(x)[\mathbb{1}_{A_1}(x) + \mathbb{1}_{A_2}(x)]dx \quad (59)$$

$$= \int g(x)f(x)dx \quad (60)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \quad (61)$$

Avec $\mathbb{1}_{A_1}(x) + \mathbb{1}_{A_2}(x) = 1$ puisque ces deux ensembles partitionnent E . Un estimateur non biaisé pour cette espérance est :

$$\overline{Y_p} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (g(x_i)\mathbb{1}_{A_1}(x_i) + g(x'_i)\mathbb{1}_{A_2}(x'_i)) \quad (62)$$

L'échantillonnage de Y_p peut être réalisé en échantillonnant X , puis X' , puis en sommant les contributions. La contribution de X à l'échantillon sera non nulle seulement si $x_i \in A_1$. La contribution de X' sera non nulle seulement si $x'_i \in A_2$. Dans le cas où une contribution est non nulle, sa valeur est $g(x_i)$ ou $g(x'_i)$, comme elle serait dans le cas analogue. En termes de transport de particules, cela signifie que lorsqu'un processus aléatoire doit être échantillonné, il est possible de diviser les évènements possibles en plusieurs ensembles. Le processus est échantillonné de manière analogue autant de fois qu'il y a de sous-ensembles définis. Chaque contribution est non-nulle uniquement si la réalisation de la variable aléatoire tombe dans l'ensemble correspondant.

La variance pour cette variable est :

$$\sigma^2(Y_p) = \int (g(x)\mathbb{1}_{A_1}(x) + g(x)\mathbb{1}_{A_2}(x))^2 f(x)dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (63)$$

$$= \int g(x)^2 f(x)dx - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (64)$$

$$= \sigma^2(Y) \quad (65)$$

Elle peut être estimée par :

$$\overline{\sigma^2}(Y_p) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (g(x_i)^2 \mathbb{1}_{A_1}(x_i) + g(x'_i)^2 \mathbb{1}_{A_2}(x'_i)) - \overline{Y_p}^2 \quad (66)$$

La variance n'est pas modifiée, mais l'échantillonnage de Y_p requiert les échantillonnages des deux variables X et X' contre un seul échantillonnage de X pour la variable analogue. Appliquée seule, cette séparation représente donc une perte d'efficacité. Il s'agit toutefois d'une étape nécessaire à l'échantillonnage systématique, et elle permet ensuite d'appliquer un conditionnement aux variables ainsi séparées.

Conditionnement

La seconde étape de l'échantillonnage systématique, le conditionnement, pourrait être décrite comme l'échantillonnage d'une variable aléatoire sachant qu'un évènement particulier doit nécessairement se produire. La probabilité de cet évènement doit être connue, généralement par calcul analytique, et l'échantillon ainsi obtenu est pondéré par cette probabilité.

Si un évènement donné se produit nécessairement, alors l'évènement complémentaire ne peut pas se produire. L'ensemble de définition de la variable conditionnée est donc limité par rapport à celui de la variable d'origine, et l'estimateur utilisé peut alors être biaisé. La séparation préalable de la variable d'intérêt par partitionnement permet d'isoler chaque sous-ensemble de l'ensemble de définition d'origine de la variable analogue. Il est alors possible d'appliquer le conditionnement à l'une des variable aléatoires ainsi créées sans négliger le ou les évènements complémentaires.

Supposons que la variable d'intérêt est $Y = g(X)$, avec $X \in A_1$ et $X \in A_2$ deux évènements complémentaires qui partitionnent l'ensemble de définition de la variable X . Si l'évènement $X \in A_1$ est plus intéressant pour l'estimation recherchée, alors on souhaiterait échantillonner la variable conditionnelle $X_{|X \in A_1}$ (X sachant que l'évènement $X \in A_1$ s'est produit).

La variable Y doit d'abord être partitionnée en une variable $Y_{p_1} + Y_{p_2}$ telle que :

$$Y_{p_1} + Y_{p_2} = g(X)\mathbb{1}_{A_1}(X) + g(X')\mathbb{1}_{A_2}(X') \quad (67)$$

avec X et X' définies par la densité de probabilité $f(x)$. Il est maintenant possible de remplacer la variable Y_{p_1} par une variable conditionnée de même espérance. L'espérance de Y_{p_1} est :

$$\mathbb{E}(Y_{p_1}) = \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_1}(x)dx \quad (68)$$

La densité de probabilité $f(x|X \in A_1)$ de la variable $X_{|X \in A_1}$ est définie comme :

$$f(x|X \in A_1) = \frac{f(x)\mathbb{1}_{A_1}(x)}{P(X \in A_1)} \quad (69)$$

On obtient alors :

$$\mathbb{E}(Y_{P_1}) = \int g(x)f(x|X \in A_1)P(X \in A_1)dx \quad (70)$$

La variable Y_{P_1} peut donc être remplacée par $Y_{|X \in A_1}$, avec un facteur de pondération égal à $P(X \in A_1)$. Finalement, la variable non-analogue devient $Y_C = Y_{|X \in A_1} + Y_{P_2}$. On peut vérifier que :

$$\mathbb{E}(Y_C) = \int g(x)f(x|X \in A_1)P(X \in A_1)dx + \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_2}(x)dx \quad (71)$$

$$= \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_1}(x)dx + \int g(x)f(x)\mathbb{1}_{A_2}(x)dx \quad (72)$$

$$= \mathbb{E}(Y) \quad (73)$$

Et enfin, un estimateur non biaisé de cette espérance est :

$$\overline{Y_C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(g(x_i)P(X \in A_1) + g(x'_i)\mathbb{1}_{A_2}(x'_i) \right) \quad (74)$$

En termes de transport de particules, cela signifie que la particule est divisée en deux au moment d'un processus aléatoire. Pour la première particule, le processus est échantillonné selon la densité de probabilité conditionnelle sur un ensemble réduit et son poids est multiplié par la probabilité correspondante. Pour la seconde, l'échantillonnage est analogue mais la contribution est nulle si la réalisation n'appartient pas à l'ensemble complémentaire. On notera que dans le cas de la technique standard de l'échantillonnage systématique, chaque variable aléatoire est traité de manière conditionnelle [Lux and Koblinger, 1991]. Nous verrons cependant que dans le cas du transport pseudo-déterministe, seule l'une des deux variables est ainsi transformée.

La variance de Y_C est :

$$\sigma^2(Y_C) = \int \left(g(x)P(X \in A_1) + g(x')\mathbb{1}_{A_2}(x') \right)^2 f(x|X \in A_1)f(x')\mathbb{1}_{A_2}(x')dx dx' - \mathbb{E}(Y)^2 \quad (75)$$

Et un estimateur non biaisé est :

$$\overline{\sigma^2}(Y_C) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(g(x_i)P(X \in A_1) + g(x'_i)\mathbb{1}_{A_2}(x'_i) \right)^2 - \overline{Y_C}^2 \quad (76)$$

L'utilisation d'une variable conditionnée suppose de connaître la probabilité de l'évènement conditionnant, ou de pouvoir la calculer au moment de l'échantillonnage. Elle permet cependant de garantir qu'un évènement particulier se produira, bien que sa contribution soit pondérée, même lorsque sa probabilité est très faible.

3.5 Conclusion

Le transport de particules pas à pas est un processus markovien. La variable aléatoire que représente l'énergie déposée au cours d'une histoire est analogue lorsqu'elle suit les lois physiques, mais elle peut être modifiée par des techniques dites de réduction de variance tant que son espérance est connue. Ces méthodes permettent généralement d'accélérer l'échantillonnage de la variable ou de diminuer sa variance, et accélèrent ainsi le calcul. Les différentes techniques présentées ci-dessus constituent seulement une partie des méthodes existantes. Bien que basiques, elles illustrent raisonnablement bien les différentes possibilités de modification de la variable analogue et les mécanismes utilisés pour obtenir une variable de même espérance.

Une méthode de réduction de variance particulière, le transport pseudo-déterministe, s'appuie en grande partie sur les techniques présentées ici. Après justification du choix de cette technique pour le calcul de la dose hors-champ, la partie suivante décrit en détail sa construction à partir des procédés présentés précédemment.

4 Transport pseudo-déterministe : présentation et formalisation

4.1 Introduction

La méthode du transport pseudo-déterministe est généralement décrite de manière très succincte dans la littérature. La description la plus détaillée se trouve dans la documentation du code MCNP [X-5 Monte Carlo Team, 2003], où une version de la méthode est implémentée sous le nom de DXTRAN. Aucune formalisation précise n'est cependant disponible à ce jour. Elle est pourtant essentielle : afin de garantir que la méthode n'introduit pas de biais dans l'estimation réalisée, il est nécessaire de s'assurer que l'espérance de la variable aléatoire non-analogue correspondante est bien, en définitive, la même que celle de la variable analogue.

Ce chapitre a pour objectif, dans un premier temps, de motiver le choix de la méthode du transport pseudo-déterministe pour traiter le problème de la dose hors-champ. Dans un second temps, après avoir fait une description générale du transport pseudo-déterministe, il se concentre sur le calcul de l'espérance associée à la variable aléatoire non-analogue. Ce calcul pourrait éventuellement⁸ être fait à partir de la description de la méthode donnée dans MCNP, en formalisant directement la variable non-analogue, puis en montrant que l'espérance associée est équivalente à celle de la variable analogue. Toutefois, il a été choisi ici de prendre la variable analogue comme point de départ, puis de la modifier petit à petit via les techniques de bases présentées dans le chapitre précédent, pour construire la variable associée au transport pseudo-déterministe.

L'objectif de cette construction pas à pas, en plus de se familiariser avec la méthode, est de mieux comprendre les mécanismes mis en jeu et les interactions entre les différentes méthodes constituantes. Elle permet également de comprendre quels éléments relèvent de la méthode elle-même et lesquels sont, dans le cas de MCNP, des choix de l'équipe de développement.

4.2 Choix de la méthode utilisée

De nombreuses méthodes de réduction de variance existent dans les différents codes Monte-Carlo utilisés pour le calcul de dose en radiothérapie. La plupart d'entre elles ne sont cependant pas adaptées au problème de la dose hors-champ ou sont insuffisantes. Notamment, parmi les méthodes potentiellement utiles pour ce type d'estimation, on retrouve :

- Le Bremsstrahlung Renforcé, augmente la probabilité d'émission d'un photon par bremsstrahlung dans un cône défini par l'utilisateur, ainsi que le nombre de photons émis lors de cet événement. Cette technique pourrait éventuellement améliorer la contribution des fuites de la tête de l'accélérateur, en définissant un cône dirigé hors-champ dans lequel davantage de photons seraient envoyés à la suite d'une interaction d'un électron primaire dans la cible de l'accélérateur. Les photons ainsi créés doivent cependant traverser toute la collimation pour contribuer à la dose, ce que la technique ne traite pas. De plus, les contributions dues aux diffusions (dans la tête de la machine et dans le patient) ne sont pas impactées même si elle sont majoritaires pour la dose

8. Certains points ne sont pas mentionnés dans cette description, et une formalisation directe serait donc tout de même délicate.

déposée. Cette technique seule ne serait donc pas suffisante.

- Le Bremsstrahlung Dirigé force la direction d'émission d'un photon vers une sphère placée arbitrairement dans l'espace, lors d'une interaction par bremsstrahlung. Cette technique possède les mêmes limites que le bremsstrahlung renforcé.
- Le renforcement des interactions modifie la probabilité d'un type d'interaction par rapport aux autres sans modifier la probabilité totale d'interaction d'une particule. Cette technique pourrait être utilisée pour favoriser les diffusions relativement aux absorptions, permettant une meilleure prise en compte des composantes de diffusion de la dose hors-champ. Toutefois, elle n'agit pas sur la direction des particules et ne leur permet pas d'atteindre préférentiellement des régions éloignées.

Finalement, la combinaison du splitting et de la roulette russe est l'une des techniques les plus communes. Une méthode d'utilisation répandue consiste à employer l'une ou l'autre de ces techniques en fonction de la position des particules : lorsqu'elles s'approchent d'une région d'intérêt, le splitting est appliqué pour augmenter la probabilité d'y obtenir des contributions. Lorsqu'elles s'en éloignent, la roulette peut être utilisée pour les éliminer. Cela conduit à définir un ensemble de zones dans lesquelles le splitting et la roulette seront plus ou moins employés selon la proximité avec la région d'intérêt.

À nouveau cependant, ce procédé est insatisfaisant : T. E. Booth *et al.* expliquent que, lorsque les particules ne sont pas dirigées vers la région d'intérêt, le splitting multiplie simplement le nombre de particules présentes dans une région de l'espace, mais celles-ci continuent leur chemin dans la mauvaise direction avant d'être supprimées par la roulette [Thomas E. Booth and Martz, 2011]. Cette situation est illustrée ci-dessous sur la figure 27.

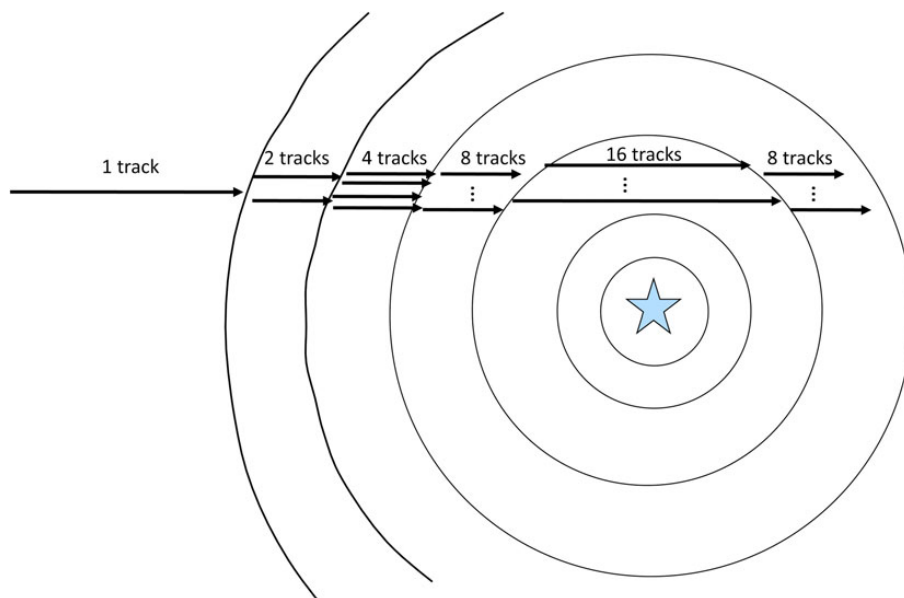


FIGURE 27 – [Thomas E. Booth and Martz, 2011] Le splitting est insuffisant pour les problèmes où la direction des particules est importante. Ici, le nombre de trajectoires est multiplié à la traversée de chaque région, mais les particules n'atteignent pas mieux la région en étoile.

Les insuffisances que présentent les méthodes précédemment décrites mettent en évidence le besoin d'influencer à la fois la direction des particules émises *et* le lieu d'interaction ou la distance parcourue avant d'interagir, en vue de leur permettre de traverser la collimation ou les tissus du patient pour atteindre des régions distantes.

La méthode choisie pour aborder le problème de la dose hors-champ est appelée transport pseudo-déterministe ou transport déterministe. Elle possède les deux caractéristiques mentionnées ci-dessus : elle force d'abord la direction d'émission d'un photon lors d'une diffusion, puis elle contraint la particule à parcourir une certaine distance avant de pouvoir interagir. Elle permet ainsi de diriger des photons vers les régions hors-champ, puis d'obtenir des interactions à distance de la zone de traitement.

Une version de cette méthode existe dans le code de simulation Monte-Carlo MCNPX [X-5 Monte Carlo Team, 2003] sous le nom de *DXTRAN* et fait partie des techniques validées et à disposition dans celui-ci. Elle a été utilisée à plusieurs reprises pour résoudre des problèmes similaires. Notamment, R. H. Olsher, en 2006, donne un exemple d'utilisation de *DXTRAN* pour calculer un flux de photons à travers l'ouverture en chicane d'une casemate dans laquelle se trouve une source de photons isotrope. La méthode est utilisée pour amener des particules à l'entrée de la casemate et obtenir une meilleure estimation de la dose reçue à cet endroit. Dans une évaluation des méthodes de réduction de variance de MCNP, T. E. Booth *et al.* calculent le flux de neutrons dans une sphère de 7 cm de rayon, placée dans l'air à 7 km d'une source de neutrons isotrope. L'utilisation d'une variante de *DXTRAN* permet alors un gain de temps d'un facteur proche de 700 [T. E. Booth and McCready, 2009]. En radiothérapie, I. Bessières utilise *DXTRAN* pour calculer la dose reçue dans des sphères de rayon 0.5 cm, placées dans une cuve à eau à plusieurs distances de l'axe d'irradiation d'un accélérateur *GE SATURNE 43* [Bessières, 2013]. Il obtient un gain de temps compris entre 187 et 565 selon la sphère étudiée. Ces différentes études démontrent non seulement la possibilité d'utiliser cette méthode pour des problèmes similaires, mais attestent également son efficacité; c'est donc la méthode qui a été choisie pour traiter le problème de la dose hors-champ.

En revanche, bien que MCNP soit utilisé pour des calculs de dose dans le champ en radiothérapie, à ce jour, aucune publication n'a fait l'objet de l'utilisation de la méthode *DXTRAN* pour le calcul de dose hors-champ. Notamment, I. Bessières signale une incohérence entre les résultats obtenus avec MCNPX et des mesures de dose hors-champ effectuées dans des conditions de radiothérapie. Il utilise MCNPX pour un calcul de dose hors-champ à 10 cm de profondeur dans une cuve à eau irradiée en champ carré $10 \times 10 \text{ cm}^2$ par un accélérateur *GE SATURNE 43*, pour un faisceau de 12 MeV [Bessières, 2013]. Cette estimation est comparée à un calcul réalisé avec le code *PENELOPE*, et à des mesures effectuées avec une chambre d'ionisation cylindrique NE-2571. Présenté ci-dessous en figure 28, son résultat montre une surestimation de MCNPX par rapport à *PENELOPE*, qui s'accorde aux mesures. Cette différence tend également à s'accroître à mesure que l'on s'éloigne du champ (le décrochage des deux simulations à 25 cm est attribué à un défaut de modélisation géométrique).

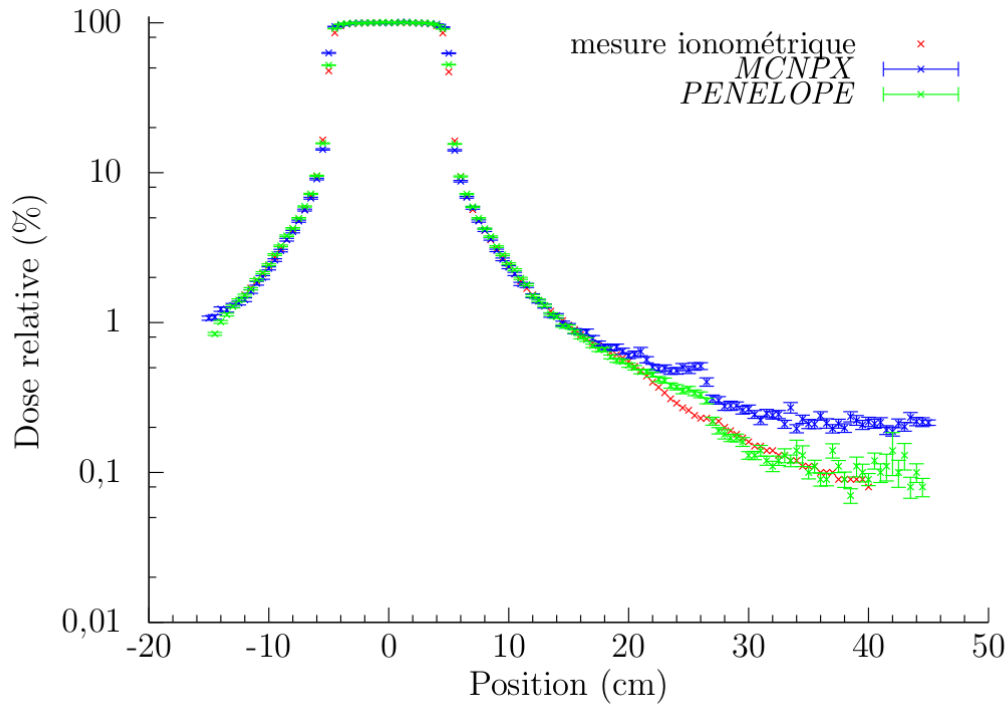


FIGURE 28 – [Bessières, 2013] Comparaison des profils de dose dans une cuve à eau pour un accélérateur *GE SATURNE 43* en champ carré $10 \times 10 \text{ cm}^2$, mesurés et simulés avec MCNPX et PENELOPE.

Cette disparité, qui n'a pas pu être attribuée à une différence sur les sections efficaces utilisées, serait due à une meilleure modélisation des phénomènes à basse énergie dans PENELOPE. L'utilisation de MCNPX pour les calculs de dose hors-champ est donc difficile : la méthode DXTRAN pourrait grandement diminuer la variance du résultat, mais ce dernier risque d'être inexact. Il s'est alors avéré nécessaire, au cours de ce travail, d'implémenter la méthode dans un code adapté pour les calculs de dose hors-champ en radiothérapie tel que PENELOPE. L'objectif est ainsi non pas d'offrir nécessairement de meilleures performances que MCNPX, mais de proposer un nouvel outil de calcul de la dose hors-champ basé sur des modèles physiques plus adaptés et mieux validés. Les détails du choix du code sont discutés en 5.2.2. La partie suivante se concentre d'abord sur la description de la méthode, puis sur sa formalisation mathématique.

4.3 Présentation du transport pseudo-déterministe

Cette technique, telle que décrite par l'équipe du Los Alamos National Laboratory dans la documentation du code MCNP [X-5 Monte Carlo Team, 2003], est utilisée lorsqu'une estimation dans une région de l'espace présente une grande variance car les particules ont une très faible probabilité de l'atteindre. Elle permet d'amener des particules jusqu'à cette région de manière déterministe (non aléatoire), diminuant la variance de la dose à estimer.

La méthode, dont le principe est illustré ci-dessous en figure 29, commence par la définition d'une sphère entourant une région d'intérêt. Elle est appliquée à tous les photons subissant

une diffusion en un point situé hors de la sphère. Au moment de l'interaction, la particule est divisée en deux :

- Une particule appelée réelle, non-déterministe ou encore complémentaire, qui est suivie normalement mais qui est tuée si elle entre dans la sphère au cours du pas suivant l'interaction,
- Une particule dite virtuelle, déterministe ou DXTRAN, qui est dirigée vers la sphère, puis est transportée à sa surface sans aucune interaction avant de reprendre un transport normal.

Les désignations de particules «Déterministe» et «Complémentaire» sont adoptées dans la suite de cette description.

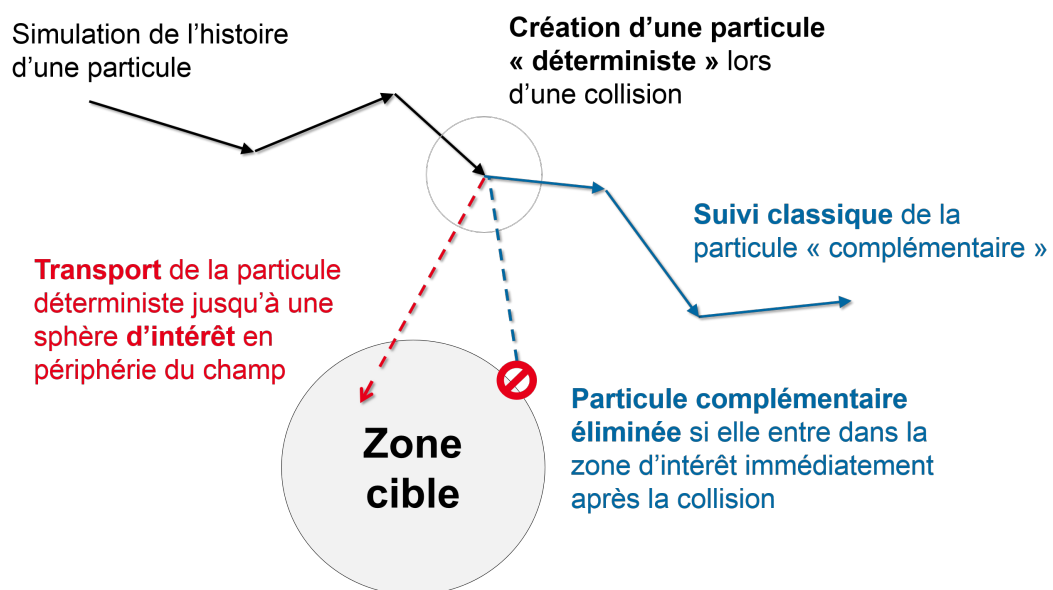


FIGURE 29 – Schéma du principe de la méthode du transport pseudo-déterministe : lors d'une interaction, la particule déterministe est amenée jusqu'à la sphère d'intérêt tandis que la particule complémentaire est transportée de manière classique mais ne peut pas entrer immédiatement dans la sphère.

Pour amener la particule déterministe jusqu'à la zone d'intérêt, sa direction à l'issue de la diffusion est échantillonnée uniquement dans l'angle solide défini par la sphère, puis le pas est échantillonné à partir de l'entrée de la sphère. Ces deux opérations reviennent à placer directement la particule à la surface de la sphère de manière déterministe avant de tirer le prochain pas, d'où le nom de la méthode. La particule est ensuite suivie normalement, sans modification de transport supplémentaire. La séparation du photon en deux particules s'apparente à un partitionnement de la variable d'intérêt, tandis que le choix forcé de la direction et du pas fait intervenir des variables aléatoires conditionnelles. Outre ces deux techniques, le transport pseudo-déterministe nécessite également l'utilisation de l'échantillonnage préférentiel. La densité de probabilité conditionnelle utilisée pour la direction de diffusion est en effet une fonction arbitraire, qui permet d'éviter un échantillonnage difficile selon la densité de probabilité conditionnelle réelle. Dans DXTRAN, cette densité permet de définir une seconde sphère à l'intérieur de la première vers laquelle

les directions sont privilégiées. Finalement, le poids de la particule est corrigé de manière à prendre en compte toutes les modifications des variables aléatoires utilisées.

La particule complémentaire, quant à elle, est suivie presque sans aucune modification : il n'y a aucun changement de poids et l'échantillonnage de la trajectoire se fait de manière analogue. Elle est cependant éliminée de la simulation si elle atteint la sphère lors du pas suivant la diffusion.

Dans MCNP, la méthode DXTRAN est accompagnée de techniques complémentaires, qui comprennent notamment un contrôle du poids des particules envoyées à la sphère via une roulette russe appliquée à celles dont le poids est trop faible. Elle est destinée à éliminer les particules dont le suivi nécessiterait trop de temps par rapport à leur contribution attendue sur la variance. L'implémentation réalisée au cours de ce travail possède ses propres techniques auxiliaires, semblables à celles de MCNP, et qui seront présentées dans le Chapitre 6.

4.4 Construction et formalisation de la méthode

4.4.1 Problème à résoudre et choix de la marche à suivre

Objectif de la réduction de variance

Si la variable aléatoire étudiée est la dose dans une zone située hors du champ d'irradiation, la probabilité qu'une particule y dépose de l'énergie peut être extrêmement faible. La majorité des histoires simulées ont alors une contribution nulle à l'estimation de la dose, sauf dans les rares cas où une particule atteint la zone d'intérêt et y dépose de l'énergie. L'estimation a alors beaucoup de difficulté à converger à cause de la variance élevée de la variable d'intérêt, et requiert le suivi d'un grand nombre de particules. Ce suivi demande généralement un temps conséquent voire excessif, et dans certains cas aucune estimation ne peut même être obtenue compte tenu des moyens de calcul disponibles.

L'utilisation d'une méthode de réduction de variance doit permettre d'accélérer la convergence de l'estimation en améliorant l'efficacité de la simulation. Nous avons vu que l'efficacité peut être améliorée en diminuant la variance de la variable étudiée ou en réduisant le temps nécessaire pour l'échantillonner. Dans notre cas, le problème provient de la variance élevée de la variable aléatoire «dose hors champ» et on cherchera donc en priorité à abaisser cette variance. Dans un cas idéal, toutes les histoires contribueraient de manière équivalente et la variance serait nulle. Ce n'est évidemment pas possible compte tenu de la nature stochastique de la simulation (et de la physique qu'elle simule). On peut, en revanche, favoriser les histoires des particules qui vont potentiellement interagir dans la zone d'intérêt et augmenter ainsi la probabilité d'obtenir une contribution non nulle.

On notera que la méthode, qui doit être applicable à n'importe quel problème, doit permettre un gain d'efficacité dans une région de forme quelconque. Il est pratique de définir une forme par défaut, qui devra, lors de l'utilisation de la méthode, englober la zone d'intérêt réelle (par exemple un organe éloigné de l'axe du faisceau). On choisit ainsi d'utiliser une région d'intérêt sphérique, pour la simplicité d'échantillonnage et la facilité d'utilisation. Elle est appelée sphère pseudo-déterministe ou simplement «sphère» par la suite.

Démarche suivie

Si une particule peut atteindre la zone d'intérêt, éloignée de l'axe du faisceau, c'est grâce aux interactions qu'elle subit au cours de son transport. En particulier, à chaque diffusion, elle a une certaine probabilité d'être redirigée vers la région hors-champ. En agissant sur la variable aléatoire donnant la direction de la particule diffusée, il est envisageable de favoriser les directions pointant vers la sphère, plus intéressantes pour l'estimation voulue. Ensuite, une particule dont la direction est déjà orientée vers la zone d'intérêt pourra éventuellement l'atteindre lors de l'échantillonnage du pas. De même que précédemment, il est alors possible de favoriser les pas permettant de l'atteindre.

À l'extrême, favoriser un évènement signifie échantillonner une variable aléatoire non-analogue conditionnée par la réalisation de cet évènement. En l'occurrence, lorsqu'une diffusion se produit, on souhaite échantillonner la direction de la particule diffusée conditionnée par l'évènement «*la direction pointe vers la sphère*». De même, dans le cas où la particule est déjà dirigée vers cette région, on souhaite échantillonner le pas de manière conditionnelle pour garantir qu'il sera suffisant pour l'atteindre. Nous avons cependant vu en 3.4.5 que, pour ne pas biaiser l'estimateur d'espérance, l'échantillonnage de chaque variable conditionnelle doit être précédé d'un partitionnement qui donne naissance à une variable complémentaire. Dans le cadre du transport de particules, cela revient à dédoubler le photon lors de l'échantillonnage de la direction puis lors de l'échantillonnage du pas, pour obtenir à chaque fois une nouvelle particule complémentaire. Cette double application du partitionnement et du conditionnement est illustrée ci-après sur la figure 30.

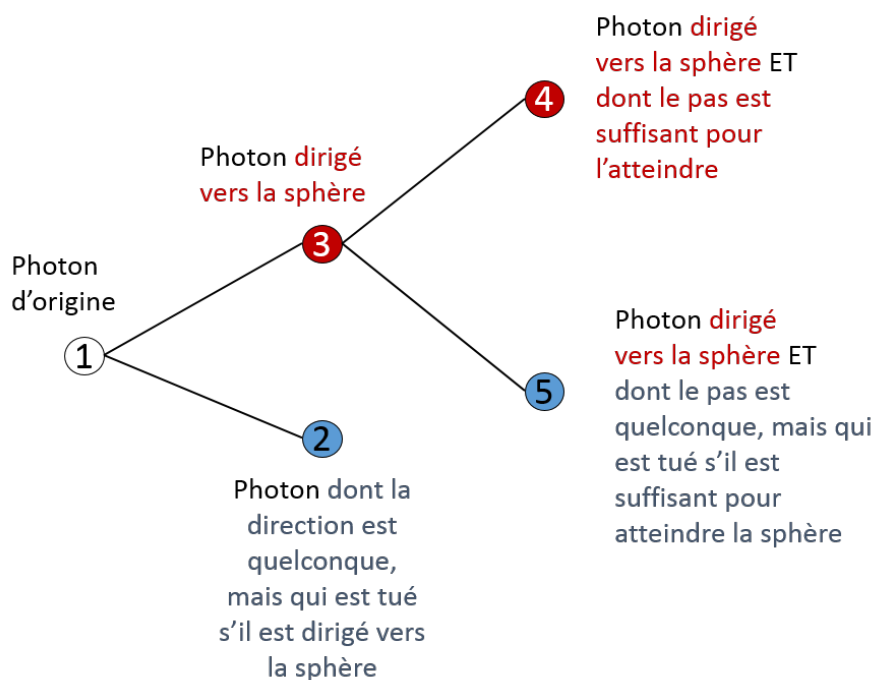


FIGURE 30 – Diagramme des différents photons issus des partitionnements et conditionnements appliqués à la direction de diffusion puis au pas de la particule. Les éléments en rouge correspondent à des variables conditionnelles, et les éléments en bleu correspondent à des variables complémentaires.

Après une première séparation, la direction de diffusion de l'un des deux photons peut

être échantillonnée de manière conditionnelle vers la sphère (photon 3 sur la figure 30), avec modification de son poids. La direction de l'autre photon doit être échantillonnée de manière analogue, à condition qu'il soit tué s'il est dirigé vers la région d'intérêt puisqu'il s'agit de la variable complémentaire (photon 2 sur le diagramme).

Cette première séparation permet d'obtenir une particule nécessairement dirigée vers la sphère (le photon 3). Elle est alors de nouveau dédoublée : pour la première, le pas est échantillonné de manière conditionnelle pour lui permettre d'atteindre la région d'intérêt (photon 4) et son poids est ajusté. Pour la seconde particule créée, le pas est choisi de manière analogue mais elle est tuée si la distance est suffisante pour atteindre la sphère (photon 5).

Trois particules doivent ici être suivies, pour chaque évènement possible (photons 2, 4 et 5 sur la figure 30). Nous verrons par la suite en 4.4.5 que ces deux séparations consécutives ne demandent pas nécessairement le suivi des trois particules : les variables aléatoires correspondant aux photons 2 et 5 peuvent en effet être regroupées pour ne suivre qu'un seul photon, dont la direction est quelconque mais qui doit être tué s'il entre dans la sphère au cours de son pas. On obtient alors uniquement deux photons, qui correspondent aux particules déterministe et «non-déterministe» de DXTRAN.

Les sections suivantes, après avoir donné une formalisation de l'échantillonnage analogue d'une diffusion, donnent le détail de la construction décrite ci-dessus, par deux séparations successives puis regroupement des deux variables complémentaires.

4.4.2 Échantillonnage d'une diffusion quelconque

Soit une variable aléatoire Y_{Dose} donnant la dose déposée au cours d'une histoire dans une région donnée. Elle est fonction de l'histoire d'une particule, elle-même composée de processus physiques associés à des variables notées X_0 à X_n . Y_{Dose} peut alors s'exprimer comme une fonction h de ces derniers :

$$Y_{Dose} = h(X_0, \dots, X_n) \quad (77)$$

Si on suppose que l'histoire de cette particule comprend une diffusion entre deux processus physiques quelconques X_k et X_l , alors la variable aléatoire Y_{Dose} peut s'exprimer comme :

$$Y_{Dose} = h(X_0, \dots, X_k, \vec{\Omega}, X, X_l, \dots, X_n) \quad (78)$$

où

- $\vec{\Omega}$ est le vecteur donnant la direction de diffusion (il sera noté Ω par la suite pour alléger les notations). Une réalisation de Ω sera notée ω .
- X est le pas parcouru par la particule avant la prochaine interaction. Une réalisation de X sera notée x .

Dans le but de simplifier les notations, on ne considère ici qu'un seul processus X_0 précédant la diffusion, et un seul X_n lui succédant. Toute la démonstration suivante est cependant généralisable pour un nombre quelconque de processus avant et après la diffusion. On écrit alors ici Y_{Dose} comme :

$$Y_{Dose} = h(X_0, \Omega, X, X_n) \quad (79)$$

Dans le cas de la dose déposée au cours d'une histoire, une réalisation de la variable aléatoire étudiée est la somme de toutes les doses individuelles déposées sur le parcours des particules.

La fonction h peut ainsi s'écrire comme une somme des doses déposées respectivement avant et après la diffusion :

$$h(X_0, \Omega, X, X_n) = g_0(X_0) + g(\Omega, X, X_n) \quad (80)$$

La variable Y_{Dose} peut alors s'exprimer comme :

$$Y_{Dose} = Y_0 + Y \quad (81)$$

avec

$$Y_0 = g_0(X_0) \quad (82)$$

et

$$Y = g(\Omega, X, X_n) \quad (83)$$

La densité de probabilité jointe des variables X_0 à X_n est donnée par :

$$f(x_0, \omega, x, x_n) \quad (84)$$

L'espérance de Y_{Dose} peut alors s'exprimer comme :

$$\mathbb{E}(Y_{Dose}) = \int h(x_0, \omega, x, x_n) f(x_0, \omega, x, x_n) dx_0 d\omega dx dx_n \quad (85)$$

$$= \int [g_0(x_0) + g(\omega, x, x_n)] f(x_0, \omega, x, x_n) dx_0 d\omega dx dx_n \quad (86)$$

$$= \int g_0(x_0) f(x_0, \omega, x, x_n) dx_0 d\omega dx dx_n \quad (87)$$

$$+ \int g(\omega, x, x_n) f(x_0, \omega, x, x_n) dx_0 d\omega dx dx_n$$

$$= \mathbb{E}(Y_0) + \mathbb{E}(Y) \quad (88)$$

La variable Y_{Dose} suit la densité de probabilité $f(x_0, \omega, x, x_n)$, son échantillonnage se fait donc naturellement par le suivi d'une particule. La valeur de Y_0 est déterminée par le calcul de la dose déposée par l'ensemble de l'histoire jusqu'à la diffusion considérée; elle ne tient pas compte des doses déposées après. Celles-ci sont prises en compte par Y , qui est la dose déposée par la suite de l'histoire, pendant et après la diffusion. On notera que, même si elle ne dépend que de Ω , X et X_n , l'échantillonnage de Y nécessite le suivi de la particule avant la diffusion (X_0) puisque seules les densités de probabilité conditionnées par les réalisations des processus précédents sont connues. En l'occurrence, $f(x_0, \omega, x, x_n)$ est exprimée comme :

$$f(x_0, \omega, x, x_n) = f(x_n, x, \omega | X_0 = x_0) f(x_0) \quad (89)$$

L'échantillonnage selon cette densité se fait par tirage selon $f(x_0)$, puis selon $f(\omega | X_0 = x_0)$, et ainsi de suite.

L'application du transport pseudo-déterministe se faisant par séparation du photon au moment de la diffusion, elle intervient donc uniquement sur la variable $Y = g(\Omega, X, X_n)$. Afin d'alléger les notations dans la suite de la démonstration, on omettra volontairement le conditionnement en x_0 et on considérera que la variable Y suit la densité de probabilité $f(x_n, x, \omega)$.

4.4.3 Conditionnement de la direction de diffusion

Pour garantir qu'une particule soit dirigée vers la sphère après l'interaction, on souhaite introduire la variable conditionnelle $\Omega_{|\Omega \in S}$, où S est l'ensemble des directions pointant vers la sphère (on appellera l'ensemble complémentaire \bar{S}). Pour ne pas introduire de biais, la variable non-analogue devra être la somme de cette variable conditionnelle et d'une seconde variable définie sur l'ensemble complémentaire (voir la partie 3.4.5). La variable non-analogue correspondante, qui remplace $g(\Omega, X, X_n)$, est alors :

$$g(\Omega, X, X_n)_{|\Omega \in S} P(\Omega \in S) + g(\Omega', X', X'_n) \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega') \quad (90)$$

Où X et X' sont définies par la même densité de probabilité $f(x)$, X_n et X'_n sont définies par la même densité de probabilité $f(x_n)$, et idem pour Ω et Ω' . Comme nous l'avons vu précédemment, ce partitionnement de la variable ne modifie pas son espérance ; l'estimation réalisée en sommant les deux contributions obtenues n'est donc pas biaisée. Il en sera de même pour toutes les opérations réalisées par la suite sur cette variable, qui ont été décrites dans le chapitre précédent auquel on pourra se référer.

Cette somme de variables correspond au suivi de deux particules. L'une est conditionnée par l'évènement $\Omega_{|\Omega \in S}$ et sera nécessairement dirigée vers la sphère, mais la contribution du reste de son histoire à l'échantillon sera toutefois pondérée par $P(\Omega \in S)$. Pour la seconde, la direction est échantillonnée de manière analogue, mais sa contribution à l'échantillon est nulle si $\omega \in S$. Autrement dit, la particule est tuée et son suivi est interrompu si elle est dirigée vers la sphère. On notera que cette particule complémentaire pourrait également être traitée de manière conditionnelle en utilisant $g(\Omega', X', X'_n)_{|\Omega' \in \bar{S}} P(\Omega' \in \bar{S})$. Ce n'est toutefois pas utile ici puisqu'elle ne contribuera très probablement pas à l'estimation dans la sphère.

4.4.4 Conditionnement du pas parcouru après diffusion

La variable $g(\Omega, X, X_n)_{|\Omega \in S} P(\Omega \in S)$ correspond à une particule obligatoirement dirigée vers la sphère après l'interaction (il s'agit du photon 3 sur la figure 30). Si on appelle A l'ensemble des valeurs du pas suffisantes pour atteindre la sphère et \bar{A} l'ensemble complémentaire, alors on souhaite introduire la variable conditionnelle $X_{|\Omega=\omega, X \in A}$ pour garantir qu'une particule atteigne la sphère grâce à un pas suffisant. On applique donc un partitionnement et un conditionnement à la variable $g(\Omega, X, X_n)_{|\Omega \in S} P(\Omega \in S)$, qui est remplacée par la variable non-analogue :

$$g(\Omega, X, X_n)_{|\Omega \in S, X \in A} P(\Omega \in S) P(X \in A | \Omega = \omega) + g(\Omega'', X'', X''_n)_{|\Omega'' \in S} P(\Omega'' \in S) \mathbb{1}_{\bar{A}}(X'')_{|\Omega'' \in S} \quad (91)$$

Où les variables notées prime et double prime suivent à nouveau la même densité de probabilité. Ces deux termes correspondent aux particules 4 et 5 sur la figure 30. La variable échantillonnée jusqu'alors devient :

$$g(\Omega, X, X_n)_{|\Omega \in S, X \in A} P(\Omega \in S) P(X \in A | \Omega = \omega) + g(\Omega'', X'', X''_n)_{|\Omega'' \in S} P(\Omega'' \in S) \mathbb{1}_{\bar{A}}(X'')_{|\Omega'' \in S} + g(\Omega', X', X'_n) \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega') \quad (92)$$

Les trois termes de l'expression ci-dessus indiquent qu'il y a maintenant trois particules à suivre et trois contributions à sommer pour échantillonner la variable non-analoge, qui correspondent respectivement aux photons 4, 5 et 2 sur la figure 30.

La première est une particule dirigée vers la sphère, et dont le pas parcouru est suffisant pour l'atteindre. Sa contribution est pondérée par les probabilités $P(\Omega \in S)$ et $P(X \in A|\Omega = \omega)$. C'est cette première particule qui est considérée comme pseudo-déterministe, puisqu'elle atteint obligatoirement la sphère. Nous verrons toutefois que le calcul de la probabilité $P(\Omega \in S)$ peut être problématique, et il sera nécessaire d'avoir recours à l'échantillonnage préférentiel pour résoudre le problème.

La seconde particule est dirigée vers la sphère, sa contribution est pondérée par $P(\Omega'' \in S)$, et son pas est échantillonné de manière analogue. Elle est cependant tuée si le pas est supérieur à la distance qui la sépare de la sphère dans la direction ω'' .

La troisième reste inchangée par cette dernière étape : la direction et le pas sont échantillonnés de manière analogue, mais elle est tuée si elle est dirigée vers la sphère.

Le choix de la manière de traiter les deux dernières variables est libre, dans la mesure où elles ne participent pas directement à l'estimation de la dose dans la sphère (à condition, toujours, de conserver l'espérance de cette partie de la somme). Leur contribution peut toutefois être regroupée comme celle d'une seule variable correspondant à une particule pour laquelle la direction et le pas sont échantillonnés de manière analogue, mais qui est tuée si elle entre dans la sphère au pas suivant l'interaction. Ce regroupement permet de se dispenser du suivi d'une particule et ainsi d'économiser du temps de calcul.

4.4.5 Traitement des particules complémentaires

Les deux particules non-déterministes correspondent à la variable :

$$g(\Omega'', X'', X_n'')|_{\Omega'' \in S} P(\Omega'' \in S) \mathbb{1}_{\bar{A}}(X'')|_{\Omega''=\omega''} + g(\Omega', X', X_n') \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega') \quad (93)$$

d'espérance :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{non-det} &= \int g(\omega, x, x_n) f(x, x_n | \Omega = \omega) \mathbb{1}_{\bar{A}}(x) f(\omega | \Omega \in S) P(\Omega \in S) d\omega dx dx_n \\ &+ \int g(\omega, x, x_n) f(x, x_n | \Omega = \omega) f(\omega) \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega) d\omega dx dx_n \end{aligned} \quad (94)$$

Or, on a :

$$f(\omega | \Omega \in S) P(\Omega \in S) = f(\omega) \mathbb{1}_S(\omega) \quad (95)$$

L'espérance peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{non-det} &= \int g(\omega, x, x_n) f(x, x_n | \Omega = \omega) \mathbb{1}_{\bar{A}}(x) f(\omega) \mathbb{1}_S(\omega) d\omega dx dx_n \\ &+ \int g(\omega, x, x_n) f(x, x_n | \Omega = \omega) f(\omega) \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega) d\omega dx dx_n \end{aligned} \quad (96)$$

$$= \int g(\omega, x, x_n) f(x, x_n | \Omega = \omega) f(\omega) [\mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_{\bar{A}}(x) + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega)] d\omega dx dx_n \quad (97)$$

On voit alors que cette espérance est celle de la variable⁹

$$g(\Omega', X', X'_n)[\mathbb{1}_S(\Omega')\mathbb{1}_{\bar{A}}(X') + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega')] \quad (98)$$

$g(\Omega', X', X'_n)$ est la variable analogue, il s'agit donc d'une particule suivie «normalement». Le facteur multiplicatif, en revanche, indique que la valeur de l'échantillon sera non-nulle seulement si, à la suite de l'interaction, la particule est dirigée vers la sphère mais le pas est insuffisant pour l'atteindre (facteur $\mathbb{1}_S(\Omega')\mathbb{1}_{\bar{A}}(X')$), ou si la particule n'est pas dirigée vers la sphère (facteur $\mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega')$). Autrement dit, cette particule est suivie de manière analogue mais est tuée si elle entre dans la sphère au cours du pas suivant l'interaction. Il s'agit de la particule appelée non-déterministe dans la méthode DXTRAN, qu'on appellera ici particule complémentaire. On remarque qu'aucun poids n'est à attribuer aux contributions de cette particule.

4.4.6 Utilisation de l'échantillonnage préférentiel

Nous avons vu que la particule déterministe était décrite par la variable :

$$g(\Omega, X, X_n)|_{\Omega \in S, X \in A} P(\Omega \in S)P(X \in A|\Omega = \omega) \quad (99)$$

Son échantillonnage nécessite le calcul de :

$$P(\Omega \in S) = \int_S f(\omega) d\omega \quad (100)$$

Contrairement au calcul de $P(X \in A|\Omega = \omega)$ qui est l'intégrale d'une exponentielle d'atténuation le long du chemin parcouru dans la direction ω , le calcul de $P(\Omega \in S)$ est très coûteux en temps. Dans DXTRAN, ce problème est évité en utilisant l'échantillonnage préférentiel pour la direction Ω .

L'astuce consiste à remplacer l'échantillonnage de la variable $\Omega|_{\Omega \in S}$ par celui d'une variable aléatoire Ω^* , définie uniquement sur l'ensemble S par une densité de probabilité arbitraire $f^*(\omega)$. L'espérance de la variable correspondant à la particule déterministe peut s'écrire :

$$\mathbb{E}_{Determin} = \int g(\omega, x, x_n)P(\Omega \in S)P(X \in A|\Omega = \omega)f(x, x_n|\Omega = \omega, X \in A)f(\omega|\Omega \in S)d\omega dx dx_n \quad (101)$$

$$= \int g'(\omega, x, x_n)P(\Omega \in S)f(\omega|\Omega \in S)d\omega \quad (102)$$

où l'on pose :

$$g'(\omega, x, x_n) = \int g(\omega, x, x_n)P(X \in A|\Omega = \omega)f(x, x_n|\Omega = \omega, X \in A)dx dx_n \quad (103)$$

On introduit alors la densité $f^*(\omega)$:

$$\mathbb{E}_{Determin} = \int g'(\omega, x, x_n)P(\Omega \in S)f(\omega|\Omega \in S)\frac{f^*(\omega)}{f^*(\omega)}d\omega \quad (104)$$

9. Les variables aléatoires sont notées «prime» afin de les différencier de celles utilisées dans l'expression de la particule déterministe. Elles suivent tout de même, à nouveau, la même densité de probabilité que leur équivalent double prime ou non-prime.

De plus, on a :

$$P(\Omega \in S)f(\omega|\Omega \in S) = f(\omega)\mathbb{1}_S(\omega) \quad (105)$$

L'espérance devient alors :

$$\mathbb{E}_{Determin} = \int g'(\omega, x, x_n)f^*(\omega)\frac{f(\omega)\mathbb{1}_S(\omega)}{f^*(\omega)}d\omega \quad (106)$$

Puisque Ω^* est définie uniquement sur S , on a :

$$f^*(\omega)\mathbb{1}_S(\omega) = f^*(\omega) \quad (107)$$

L'espérance correspondant à la particule déterministe peut finalement s'écrire :

$$\mathbb{E}_{Determin} = \int g'(\omega, x, x_n)f^*(\omega)\frac{f(\omega)}{f^*(\omega)}d\omega \quad (108)$$

$$= \int g(\omega, x, x_n)P(X \in A|\Omega = \omega)f(x, x_n|\Omega = \omega, X \in A)f^*(\omega)\frac{f(\omega)}{f^*(\omega)}d\omega dx dx_n \quad (109)$$

Cette espérance est celle de la variable¹⁰ :

$$Y_D = g(\Omega^*, X, X_n)|_{X \in A}P(X \in A|\Omega = \Omega^*)\frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)} \quad (110)$$

Cette variable peut être échantillonnée sans avoir recours au calcul de $P(\Omega \in S)$. En revanche, le choix de la densité arbitraire joue un rôle important dans la variance et la rapidité d'échantillonnage. Dans cette implémentation, elle est similaire à celle utilisée pour la méthode DXTRAN. Elle est décrite par la suite en 4.5.2. Finalement, la variable aléatoire associée au transport pseudo-déterministe est :

$$Y_{pseudo-det} = Y_D + Y_C \quad (111)$$

$$= g(\Omega^*, X, X_n)|_{X \in A}P(X \in A|\Omega = \Omega^*)\frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)} + g(\Omega', X', X'_n)[\mathbb{1}_S(\Omega')\mathbb{1}_{\bar{A}}(X') + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega')] \quad (112)$$

Les deux termes de la somme correspondent respectivement à une fonction de l'histoire de la particule déterministe et à une fonction de l'histoire de la particule complémentaire.

On obtient, enfin, l'expression de la variable donnant la dose déposée après application du transport pseudo-déterministe :

$$Y_{Dose,pseudo-det} = Y_0 + Y_D + Y_C \quad (113)$$

10. Ω n'est ici pas échantillonnée pour obtenir un tirage de Y_D . Sa valeur est celle de Ω^* et $P(X \in A | \Omega = \Omega^*)$ est alors simplement une fonction de Ω^* .

4.4.7 Remarques

Telle que décrite ici, on voit que la méthode peut être appliquée à n'importe quelle diffusion au cours du transport d'une particule. Son application permet d'obtenir presque certainement une contribution dans la sphère pour chaque histoire simulée, à condition que la particule déterministe interagisse dans la sphère avant de la traverser entièrement. Cependant, si la méthode n'est appliquée qu'une fois, la contribution apportée restera faible devant celle d'une particule qui atteint réellement la sphère (à cause de la différence de poids). On obtiendrait alors encore de grandes variations dans les contributions d'une histoire à l'autre et la convergence ne serait que très faiblement améliorée.

Il est préférable de la répéter autant que possible au cours du transport, au mieux lors de chaque diffusion¹¹. Ainsi, la majorité des contributions à la sphère provient des particules déterministes et aucun photon non-déterministe ne peut entrer dans la sphère, protégeant ainsi l'estimation des fluctuations de poids les plus importantes.

Pour l'application de la méthode à une diffusion, la différence de variance pour une fonction quelconque limitée à la sphère, par rapport à un échantillonnage analogue, est :

$$\begin{aligned} & \sigma^2(Y\mathbb{1}_S(\Omega)\mathbb{1}_A(X)) - \sigma^2(Y_D) \\ &= \int g(\omega, x, x_n)^2 \mathbb{1}_S(\omega)\mathbb{1}_A(x)f(x, x_n|\Omega = \omega)f(\omega)d\omega dx dx_n \\ & \quad - \int g(\omega, x, x_n)^2 f(x, x_n|\Omega^* = \omega, X \in A)P(X \in A|\Omega^* = \omega)^2 \frac{f(\omega)^2}{f^*(\omega)^2} f^*(\omega) dx d\omega dx_n \end{aligned} \quad (114)$$

$$\begin{aligned} &= \int g(\omega, x, x_n)^2 \mathbb{1}_S(\omega)\mathbb{1}_A(x)f(x, x_n|\Omega = \omega)f(\omega) dx d\omega dx_n \\ & \quad - \int g(\omega, x, x_n)^2 P(X \in A|\Omega^* = \omega)f(x, x_n|\Omega^* = \omega)\mathbb{1}_A(x) \frac{f(\omega)^2}{f^*(\omega)} dx d\omega dx_n \end{aligned} \quad (115)$$

$$= \int g(\omega, x, x_n)^2 \left(\mathbb{1}_S - \frac{f(\omega)}{f^*(\omega)} P(X \in A|\Omega^* = \omega) \right) \mathbb{1}_A(x) f(\omega) f(x, x_n|\Omega = \omega) dx d\omega dx_n \quad (116)$$

On constate bien que plus la probabilité $P(X \in A|\Omega = \omega)$ est faible (peu de chances d'atteindre la sphère dans la direction ω), plus la variance sera réduite. De même, plus $f(\omega)$ est faible sur l'ensemble S (peu de chances pour la particule d'être diffusée vers la sphère), plus la différence sera grande. Autrement dit, plus une région est difficile à atteindre pour les particules, plus la variance est améliorée par le transport pseudo-déterministe.

11. Si on ne tient pas compte du temps de calcul nécessaire à la création et au suivi des particules déterministes. Nous verrons qu'il est parfois préférable de ne pas appliquer la méthode lors de certaines diffusions.

4.5 Échantillonnage de l'angle de diffusion

4.5.1 Expression des angles

Soit P_0 le point d'interaction auquel le transport pseudo-déterministe est appliqué et P_1 le centre de la sphère. On appelle η le cosinus de l'angle θ entre l'axe P_0P_1 et la direction de la particule déterministe, et ϕ l'angle azimutal par rapport à cet axe. Une direction quelconque ω peut être exprimée comme $\omega = (\eta, \phi)$ (voir figure 31 ci-après).

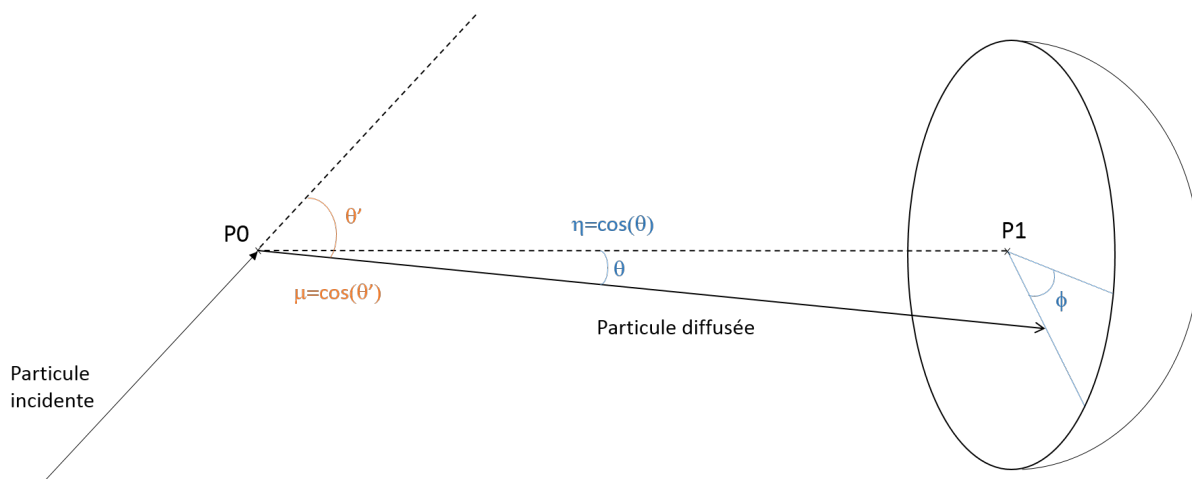


FIGURE 31 – Représentation du principe du transport pseudo-déterministe avec les différents angles utilisés.

Si l'angle ϕ est échantillonné uniformément sur $[0; 2\pi]$ et indépendamment de η , alors la densité de probabilité arbitraire $f^*(\omega)$ peut s'écrire :

$$f^*(\omega) = f^*(\eta, \phi) = f^*(\eta)f^*(\phi) = \frac{f^*(\eta)}{2\pi} \quad (117)$$

Si on appelle μ le cosinus de l'angle θ' entre la direction de la particule incidente et la direction de la particule diffusée, et ϕ' l'angle azimutal par rapport à l'axe de la particule incidente, alors la densité de probabilité $f(\omega)$ peut s'écrire :

$$f(\omega) = f(\mu, \phi') \quad (118)$$

Dans le cas d'une diffusion Compton ou Rayleigh, la densité de probabilité $f(\phi')$ est uniforme (la diffusion est symétrique par rapport à l'axe de la particule incidente). On a alors :

$$f(\omega) = f(\mu, \phi') = f(\mu)f(\phi') = \frac{f(\mu)}{2\pi} \quad (119)$$

Finalement, le facteur $\frac{f(\omega)}{f^*(\omega)}$ dans le poids de la particule déterministe devient :

$$\frac{f(\omega)}{f^*(\omega)} = \frac{f(\mu)}{f^*(\eta)} \quad (120)$$

4.5.2 Choix de la densité arbitraire

On appelle θ_0 l'angle d'ouverture du cône défini par la sphère depuis le point d'interaction, et on définit $\eta_0 = \cos \theta_0$. La densité $f^*(\eta)$ est alors définie sur l'intervalle $[\eta_0; 1]$.

Le choix fait dans la méthode DXTRAN de MCNP, qui est repris ici, est d'utiliser une densité $f^*(\eta)$ ayant la forme d'une fonction «en escalier», constante sur deux intervalles $[\eta_0; \eta_i]$ et $[\eta_i; 1]$. Ceci revient à définir une seconde sphère concentrique à l'intérieur de la sphère d'intérêt, qui délimite un second cône d'ouverture $\theta_i < \theta_0$ avec $\eta_i = \cos \theta_i$ (voir figure 32 ci-après).

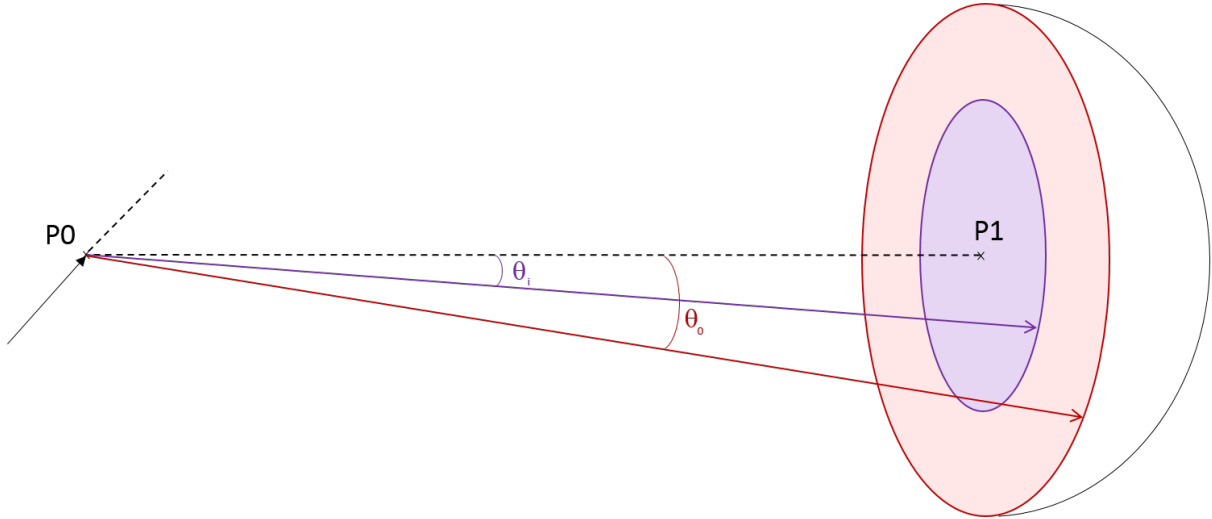


FIGURE 32 – Schéma du principe du transport pseudo-déterministe avec utilisation d'une densité de probabilité arbitraire en escalier pour le choix de l'angle de diffusion. Une seconde sphère, incluse dans la première, délimite une zone dans laquelle les diffusions sont favorisées.

On a ainsi défini :

$$f^*(\eta) = \begin{cases} \alpha & \text{si } \eta \in [\eta_0; \eta_i] \text{ (couronne extérieure)} \\ \beta & \text{si } \eta \in [\eta_i; 1] \text{ (cône intérieur)} \end{cases} \quad (121)$$

où α et β sont deux constantes à définir. La probabilité que η se trouve dans l'intervalle $[\eta_0; \eta_i]$ est :

$$P(\eta \in [\eta_0; \eta_i]) = \int_{\eta_0}^{\eta_i} f^*(\eta) d\eta = \alpha(\eta_i - \eta_0) \quad (122)$$

et la probabilité que η se trouve dans l'intervalle $[\eta_i; 1]$ est :

$$P(\eta \in [\eta_i; 1]) = \int_{\eta_i}^1 f^*(\eta) d\eta = \beta(1 - \eta_i) \quad (123)$$

Si η était échantillonné selon une densité uniforme ($\alpha = \beta$) sur $[\eta_0; 1]$, on aurait :

$$\frac{P(\eta \in [\eta_i; 1])}{P(\eta \in [\eta_0; \eta_i])} = \frac{1 - \eta_i}{\eta_i - \eta_0} \quad (124)$$

Cette valeur représente le rapport de la probabilité d'obtenir une direction dans la sphère

intérieure sur la probabilité d'obtenir une direction dans la couronne extérieure dans le cas où $\alpha = \beta$. On souhaiterait ici choisir α et β de manière à augmenter d'un facteur Q la probabilité d'obtenir des diffusions dans la sphère intérieure, ce qui correspond à un rapport :

$$\frac{P(\eta \in [\eta_i; 1])}{P(\eta \in [\eta_0; \eta_i])} = Q \frac{1 - \eta_i}{\eta_i - \eta_0} \quad (125)$$

où $Q \geq 1$ est défini par l'utilisateur. La densité de probabilité $f^*(\eta)$ étant définie sur $[\eta_0; 1]$, on a nécessairement :

$$P(\eta \in [\eta_0; \eta_i]) + P(\eta \in [\eta_i; 1]) = 1 \quad (126)$$

Ce qui donne les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \frac{P(\eta \in [\eta_i; 1])}{P(\eta \in [\eta_0; \eta_i])} = Q \frac{1 - \eta_i}{\eta_i - \eta_0} \\ P(\eta \in [\eta_i; 1]) + P(\eta \in [\eta_0; \eta_i]) = 1 \end{cases} \quad (127)$$

Elles sont vérifiées si :

$$P(\eta \in [\eta_0; \eta_i]) = \frac{\eta_i - \eta_0}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} \quad (128)$$

et

$$P(\eta \in [\eta_i; 1]) = \frac{Q(1 - \eta_i)}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} \quad (129)$$

En utilisant les équations 122 et 128, puis 123 et 129, on obtient ainsi la densité de probabilité arbitraire :

$$f^*(\eta) = \begin{cases} \alpha = \frac{P(\eta \in [\eta_0; \eta_i])}{\eta_i - \eta_0} = \frac{1}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} \text{ si } \eta \in [\eta_0; \eta_i] \\ \beta = \frac{P(\eta \in [\eta_i; 1])}{1 - \eta_i} = \frac{Q}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} \text{ si } \eta \in [\eta_i; 1] \end{cases} \quad (130)$$

4.6 Considérations finales

4.6.1 Poids associé à la particule déterministe

La variable aléatoire associée à la particule déterministe est (voir 4.4.6 équation 110) :

$$Y_D = g(\Omega^*, X, X_n)_{|X \in A} P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)} \quad (131)$$

L'estimateur utilisé pour son espérance est alors :

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(\omega_i, x_i, x_{n,i}) P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\omega_i)}{f^*(\omega_i)} \quad (132)$$

Avec N le nombre total d'histoires simulées. Le facteur multipliant le poids porté par la particule déterministe après une diffusion est égal à :

$$P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\omega)}{f^*(\omega)} \quad (133)$$

Le premier terme correspond à la probabilité que la particule atteigne la sphère, sachant que sa direction est ω . Il s'agit de l'exponentielle d'atténuation le long du trajet de longueur $L(\omega)$ entre la particule et la surface de la sphère dans la direction ω .

On appelle $\Sigma(s, E)$ la section efficace macroscopique totale d'interaction pour une particule d'énergie E à la position s . On note que l'énergie de la particule après diffusion dépend de l'angle ω échantillonné, et donc Σ en dépend également. La probabilité qu'une particule traverse la distance $L(\omega)$ sans interagir est :

$$P(X \in A | \Omega = \Omega^*) = \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, E) ds\right) \quad (134)$$

Avec P_0 le point d'interaction et P_S le point d'arrivée sur la sphère. Le second terme est le rapport des densités de probabilité analogue sur arbitraire, et a été explicité en 4.5.2. Le poids de la particule est donc finalement multiplié par le facteur :

$$P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\omega)}{f^*(\omega)} = \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, E) ds\right) \frac{f(\mu)}{f^*(\eta)} \quad (135)$$

$$= \begin{cases} \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, E) ds\right) f(\mu) (Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0) & \text{si } \eta \in [\eta_0; \eta_i] \\ \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, E) ds\right) f(\mu) \frac{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0}{Q} & \text{si } \eta \in [\eta_i; 1] \end{cases} \quad (136)$$

4.6.2 Gestion des particules secondaires créées

Problème rencontré

La division du photon se fait lors du choix de l'angle de diffusion ω . Or, l'énergie des particules secondaires créées (par exemple l'électron Compton, voir l'annexe A) dépend directement de cet angle de diffusion. Toutes les variables aléatoires associées à la suite du suivi de ces particules sont conditionnées par cet angle, de la même manière que pour le photon diffusé.

Jusqu'à présent, la direction de diffusion d'une particule et le pas parcouru par la suite étaient représentés respectivement par les variables aléatoires Ω et X . Le reste de son histoire, en dehors de la diffusion étudiée, correspond aux variables X_0 et X_n . La variable aléatoire étudiée pouvait alors s'exprimer comme $Y_{Dose} = g_0(X_0) + g(\Omega, X, X_n) = Y_0 + Y$. Ensuite, Y a pu être séparée en une somme de deux variables distinctes (voir 4.4.5), représentant un photon déterministe et un photon complémentaire à la suite d'une diffusion. Or, la fonction g dépend du reste de l'histoire de la particule X_n après la diffusion. Le reste de cette histoire inclut également les particules secondaires éventuellement créées par la diffusion pour chaque photon, déterministe et complémentaire. La fonction g apparaissant dans chaque terme de la somme après la séparation de Y , il serait donc a priori nécessaire de suivre deux ensembles de particules secondaires, chacun associé à l'un des deux photons créés (à cause de la présence de X_n et X_n' dans l'équation 111, qui indiquent que l'échantillonnage de la suite

de l'histoire de chaque photon est nécessaire). Par exemple, l'électron Compton associé au photon déterministe porterait le même poids que ce dernier, tandis que l'électron associé au photon complémentaire devrait être tué si ce dernier entrait dans la sphère lors du pas suivant l'interaction. Il en est de même pour toutes les particules secondaires créées par l'interaction, en l'occurrence issues de la réorganisation des couches électroniques suite à l'éjection de l'électron.

Cette démarche serait toutefois très problématique : elle nécessiterait non seulement de suivre deux copies de chaque particule secondaire, en particulier les électrons dont le temps de simulation est long, mais également d'annuler la contribution de la moitié d'entre elles si le photon complémentaire entre dans la sphère. En outre, nous verrons en 5.4 que le poids du photon déterministe n'est connu au cours de la simulation que lors de son arrivée à la sphère. Le poids des particules secondaires associées ne pourrait donc pas être donné lors de leur création.

Pour un calcul de dose cependant, il est possible de simplifier le suivi des particules secondaires. La dose déposée au cours d'une histoire, qui est ici la variable d'intérêt, se présente en effet comme la somme des contributions de la particule primaire et des particules secondaires. Dans un tel cas, il est possible de suivre, sans biaiser l'estimation, une seule copie de chaque particule secondaire (et notamment un seul électron dans le cas de la diffusion Compton). Ces particules secondaires doivent être créées et suivies de manière analogue.

Le choix a donc été fait de conserver uniquement les particules secondaires créées lors de l'émission du photon complémentaire, dont la direction est échantillonnée de manière analogue. La démarche suivie est illustrée sur la figure 33 dans un cas simplifié comportant une seule particule secondaire.

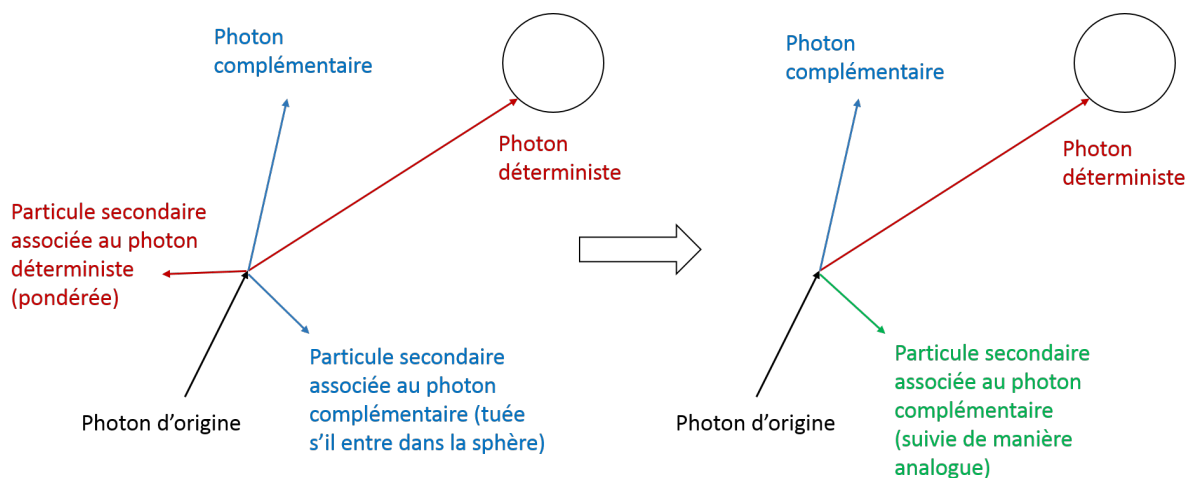


FIGURE 33 – Schéma des possibilités de gestion des particules secondaires. La figure de gauche représente la situation par défaut, dans laquelle chaque particule est associée à une particule secondaire. La méthode utilisée, illustrée à droite, consiste à suivre de manière analogue les particules secondaires créées par le photon complémentaire.

Justification de la méthode choisie pour la gestion des particules secondaires

L'ensemble des processus aléatoires rencontrés dans l'histoire d'une particule, du pas suivant l'interaction jusqu'à sa disparition, peut être représenté par les variables $X_{p_1} \dots X_{p_n}$

pour le photon, et $X_{s_1} \dots X_{s_n}$ pour n'importe quelle particule secondaire. Par souci de simplification, on se limitera ici à deux variables, X_p pour le photon et X_s pour une particule secondaire quelconque. Ce qui suit est cependant généralisable pour l'ensemble de l'histoire du photon et de chaque particule secondaire. Dans ce cas, la variable aléatoire échantillonnée peut s'écrire $Y = g(\Omega, X_p, X_s)$. Son espérance est alors :

$$\mathbb{E}(g(\Omega, X_p, X_s)) = \int g(\omega, x_p, x_s) f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (137)$$

Dans le cas d'un calcul de dose, la fonction g est une somme des contributions du photon et de la particule secondaire, c'est-à-dire qu'elle vérifie

$$g(\Omega, X_p, X_s) = h(\Omega, X_p) + h'(\Omega, X_s) \quad (138)$$

Alors l'espérance peut s'écrire comme :

$$\mathbb{E}(Y) = \int [h(\omega, x_p) + h'(\omega, x_s)] f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (139)$$

$$= \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s + \int h'(\omega, x_s) f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (140)$$

Dans cette étape intermédiaire, les deux intégrales correspondraient au suivi de deux couples photon-particule secondaire. Seule une des deux particules contribuerait à l'estimation pour chaque couple (à cause, respectivement, de la présence des fonctions $h(\omega, x_p)$ et $h'(\omega, x_s)$). Pour l'application du transport pseudo-déterministe, on souhaite maintenant partitionner l'échantillonnage de l'angle de diffusion du photon. L'espérance devient :

$$\mathbb{E}(Y) = \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) [\mathbb{1}_S(\omega) + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega)] d\omega dx_p dx_s + \int h'(\omega, x_s) f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (141)$$

$$= \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_S(\omega) d\omega dx_p dx_s + \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega) d\omega dx_p dx_s + \int h'(\omega, x_s) f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (142)$$

Il est ensuite possible de regrouper dans une seule intégrale les contributions de la particule secondaire et du photon complémentaire :

$$\mathbb{E}(Y) = \int [h'(\omega, x_s) + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega) h(\omega, x_p)] f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \quad (143)$$

$$+ \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_S(\omega) d\omega dx_p dx_s = E_1 + E_2 \quad (144)$$

L'estimation de la première intégrale correspond à une interaction analogue puis au suivi de toutes les particules créées. L'indicatrice sur \bar{S} rend cependant nulle la contribution du photon (et seulement du photon) si ce dernier est dirigé vers la sphère.

L'intégrale E_2 peut être à nouveau séparée en deux selon la distance parcourue pour le pas de la particule primaire, et on peut ainsi écrire :

$$E_2 = \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_A(x_p) d\omega dx_p dx_s \\ + \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_{\bar{A}}(x_p) d\omega dx_p dx_s \quad (145)$$

Le second terme de E_2 peut être regroupé avec le premier terme de l'expression de $\mathbb{E}(Y)$ pour obtenir :

$$\mathbb{E}(Y) = \int \left[h'(\omega, x_s) + [\mathbb{1}_{\bar{S}}(\omega) + \mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_{\bar{A}}(x_p)] h(\omega, x_p) \right] f(\omega, x_p, x_s) d\omega dx_p dx_s \\ + \int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p, x_s) \mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_A(x_p) d\omega dx_p dx_s \quad (146)$$

La première intégrale de cette expression peut être estimée en réalisant une interaction, puis en suivant les particules secondaires de manière analogue. Le photon primaire, quant à lui, contribue seulement s'il n'est pas dirigé vers la sphère ou s'il ne l'atteint pas lorsqu'il y est dirigé : il s'agit du photon complémentaire du transport pseudo-déterministe. De plus, on a :

$$\int f(\omega, x_p, x_s) dx_s = f(\omega, x_p) \quad (147)$$

Le second terme de l'équation 146 peut donc s'écrire :

$$\int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p) \mathbb{1}_S(\omega) \mathbb{1}_A(x_p) d\omega dx_p \quad (148)$$

Cette seconde intégrale ne dépend ainsi plus de x_s . Elle est donc estimée par l'émission et le suivi d'un unique photon sans particules secondaires. Ce terme peut ensuite être réécrit pour faire apparaître l'échantillonnage conditionnel de la direction puis du pas tel que :

$$\int h(\omega, x_p) f(\omega, x_p | \Omega \in S, X_p \in A) P(\Omega \in S) P(X_p \in A | \Omega = \omega) d\omega dx_p \quad (149)$$

Enfin, il est possible d'appliquer l'échantillonnage préférentiel tel que décrit en 4.4.6 pour obtenir l'expression correspondant au photon déterministe du transport pseudo-déterministe. Cette manière d'écrire et, en définitive, d'estimer l'espérance, permet de réduire le temps nécessaire au suivi des particules secondaires qui ne sont alors créées et suivies que pour le photon complémentaire.

4.6.3 Conditions d'application de la méthode

La méthode du transport pseudo-déterministe, dans ce chapitre, a été construite en écrivant la variable de la «dose déposée au cours d'une histoire» comme une fonction des différents processus décrivant cette histoire. Or, la dose n'est pas la seule estimation possible et chaque quantité à évaluer correspond à une certaine fonction de l'histoire d'une particule. Dans certains cas, l'introduction du transport pseudo-déterministe sans biais peut éventuellement demander la modification de la manière dont cette fonction est évaluée. De

même, le choix de la manière de suivre les particules secondaires est basé sur l'hypothèse que la fonction évaluée est une somme des contributions de chaque particule rencontrée dans la simulation. Ce prérequis, cependant, n'est pas vérifié pour toutes les quantités que l'on peut estimer. Cette section présente ainsi deux exemples représentatifs d'estimations d'autres quantités que la dose, et étudie la validité du transport pseudo-déterministe dans ces cas.

Estimation de la hauteur d'impulsion

L'estimation de la dose est exactement similaire à celle de l'énergie déposée, qui est faite via la moyenne des énergies déposées au cours d'une histoire. L'estimation de la «hauteur d'impulsion» (ou *pulse height*), en revanche, donne la distribution du dépôt d'énergie au cours de différentes histoires. Ce type d'estimation est généralement utilisé pour simuler la distribution en énergie des impulsions créées dans un détecteur, dans lequel plusieurs particules peuvent être comptabilisées simultanément. Une impulsion est alors comptée dans l'intervalle en énergie correspondant à la somme de leurs énergies respectives. Une illustration de ce type d'estimation est donnée ci-dessous en figure 34.

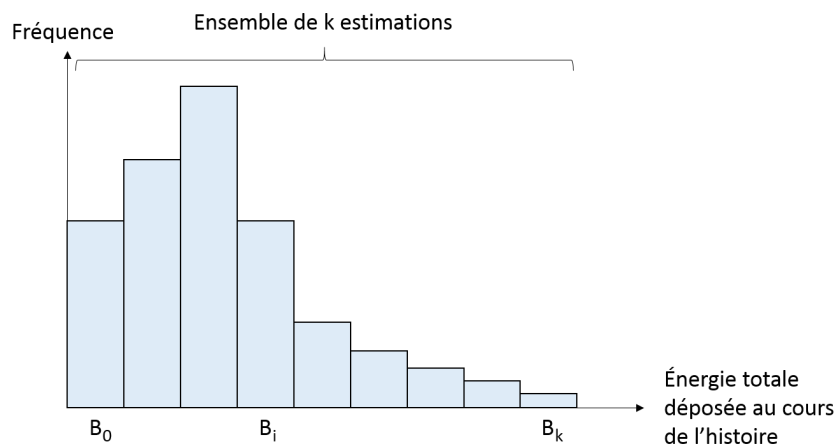


FIGURE 34 – Illustration d'une estimation de *pulse height*, donnant la fréquence des dépôts pour chaque intervalle en énergie.

La distribution des dépôts d'énergie est obtenue par un ensemble d'estimations, correspondant chacune à un intervalle en énergie de B_0 à B_k . Pour un intervalle quelconque B_i , une réalisation de la variable d'intérêt vaut :

- 1 si l'énergie déposée au cours de l'histoire est comprise dans l'intervalle B_i ,
- 0 sinon.

Si on appelle E la variable aléatoire donnant l'énergie totale déposée au cours de l'histoire, la variable aléatoire étudiée ici est :

$$Y^{pulse} = \mathbb{1}_{B_i}(E) \quad (150)$$

Or, cette énergie est elle-même une fonction de l'histoire complète d'une particule. En reprenant les notations et le raisonnement de la partie 3.3, elle peut s'écrire comme :

$$E = h(X_0, \Omega, X, X_n) \quad (151)$$

où Ω et X sont l'angle de diffusion et le pas parcouru après une diffusion quelconque au cours de l'histoire, X_0 représente les processus précédant la diffusion, et X_n ceux qui la suivent. La variable Y^{pulse} peut ainsi s'exprimer comme une fonction de ces variables :

$$Y^{pulse} = \mathbb{1}_{B_i}(E) = \mathbb{1}_{B_i}(h(X_0, \Omega, X, X_n)) = h^{pulse}(X_0, \Omega, X, X_n) \quad (152)$$

Dans le cas de la dose, il était possible d'écrire la variable aléatoire comme une somme des contributions avant et après la diffusion pour obtenir $Y_{Dose} = Y_0 + Y$. Le transport pseudo-déterministe a ensuite été appliqué à Y .

Ce n'est pas le cas ici pour Y^{pulse} , qui ne peut pas être écrite comme une somme des énergies déposées avant et après diffusion ; il s'agit, au contraire, d'une fonction de cette somme. Si les énergies déposées avant et après la diffusion sont notées respectivement $g_0(X_0)$ et $g(\Omega, X, X_n)$, on a en effet :

$$h^{pulse}(X_0, \Omega, X, X_n) = \mathbb{1}_{B_i}(g_0(X_0) + g(\Omega, X, X_n)) \quad (153)$$

On ne peut donc pas appliquer le transport pseudo-déterministe uniquement à une variable qui dépendrait de la diffusion et de la suite de l'histoire, mais seulement à Y^{pulse} dans sa totalité. On obtient alors :

$$Y_{pseudo-det}^{pulse} = Y_D^{pulse} + Y_C^{pulse} \quad (154)$$

$$= h^{pulse}(X_0, \Omega^*, X, X_n)_{|X \in A} P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)} \\ + h^{pulse}(X_0, \Omega', X', X'_n) [\mathbb{1}_S(\Omega') \mathbb{1}_{\bar{A}}(X') + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega')] \quad (155)$$

On retrouve bien l'expression d'une particule déterministe et d'une particule complémentaire. La variable X_0 est commune aux deux termes : son échantillonnage peut se faire une seule fois (il s'agit du début de l'histoire jusqu'à la diffusion), puis les deux photons créés sont suivis indépendamment.

En revanche, ici, ce n'est pas seulement la contribution de la particule déterministe après la diffusion qui doit être pondérée, mais l'ensemble de la contribution de son histoire. Autrement dit, après le calcul de l'énergie totale déposée par l'histoire de la particule avant diffusion et par le photon déterministe, l'intervalle en énergie correspondant est incrémenté de $P(X \in A | \Omega^* = \omega) \frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)}$. De même, lorsque la particule complémentaire entre dans la sphère au pas suivant la diffusion, la contribution de son histoire dans son ensemble est annulée. Un exemple illustratif est donné ci-dessous sur la figure 35.

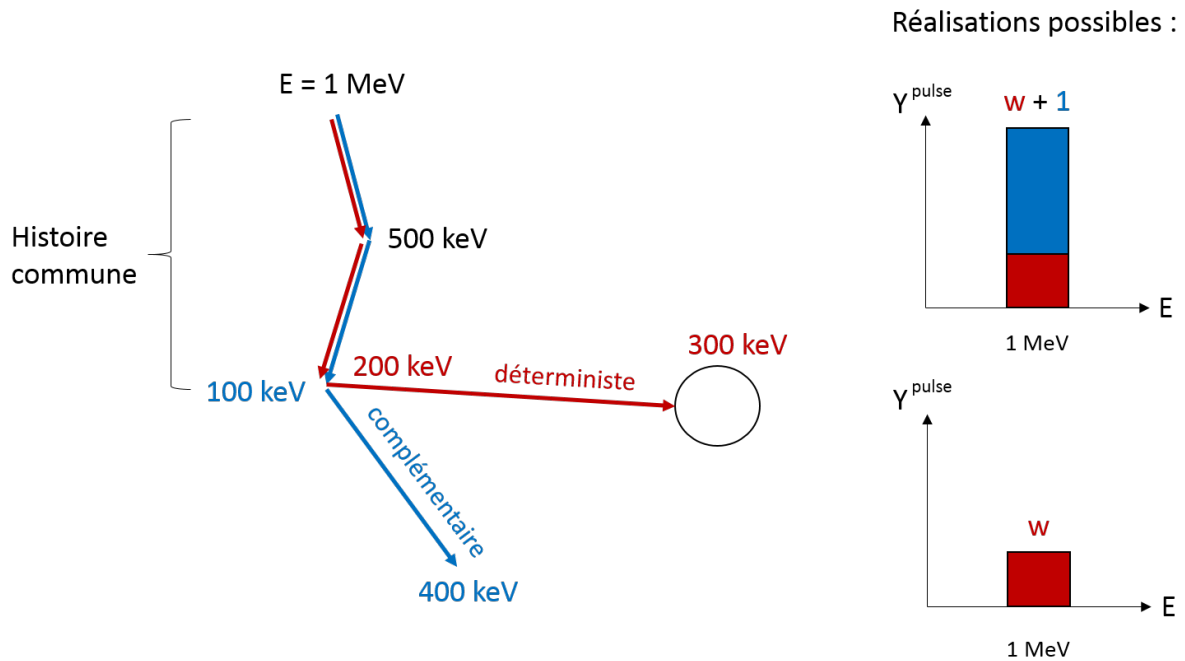


FIGURE 35 – Illustration dans un milieu infini d’une situation possible pour l’application du transport pseudo-déterministe pour l’estimation de la hauteur d’impulsion.

Ici, un photon d’énergie $E = 1 \text{ MeV}$ est émis dans un milieu infini où on estime la hauteur d’impulsion. Une première interaction a lieu, durant laquelle la particule perd la moitié de son énergie. Elle subit ensuite une diffusion pseudo-déterministe. L’angle échantillonné pour la particule déterministe, de poids w , induit une perte d’énergie de 200 keV, puis elle dépose ses 300 keV restants après son transport jusqu’à la sphère. Dans ce cas, l’intervalle contenant 1 MeV est incrémenté de w , puisqu’il s’agit de l’énergie totale déposée au cours de l’histoire de la particule déterministe. Dans le cas de la particule complémentaire, l’angle échantillonné est lié à une perte d’énergie de 100 keV, puis elle dépose les 400 keV restants dans le milieu environnant. Si elle n’entre pas dans la sphère au cours du pas suivant la diffusion, l’intervalle contenant 1 MeV est alors incrémenté de 1 (il vaut donc $w + 1$ à l’issue de l’histoire). Sinon, la totalité de l’histoire est «annulée» et l’intervalle n’est pas incrémenté à nouveau (il vaut alors w).

Bien que non-biaisée, cette manière de procéder n’est toutefois généralement pas obtenue de manière «naturelle» dans un code de simulation, dans lequel le calcul de Y^{pulse} serait fait par défaut en évaluant la somme des énergies déposées au cours de l’histoire d’une particule primaire. Notamment, sans différencier les dépôts d’énergie des photons déterministes et complémentaires, l’énergie déposée au total par ce photon serait de 1.5 MeV (avec éventuellement une pondération de la contribution déterministe) et donc même supérieure à l’énergie de la source.

De plus, si le transport pseudo-déterministe est appliqué à plusieurs reprises au cours d’une même histoire, il est nécessaire de garder en mémoire l’énergie déposée au cours de celle-ci jusqu’au moment de chaque application de la méthode. Ainsi, l’énergie totale déposée jusqu’alors peut être incrémentée de l’énergie déposée par la suite du parcours de chaque nouvelle particule pour obtenir l’intervalle à incrémenter pour cette branche de l’histoire, avec éventuellement une pondération ou une annulation de la contribution, de la même manière

que les 500 keV sont communs à chaque contribution sur la figure 35.

Les changements nécessaires à la bonne prise en compte des différentes contributions ne seront cependant pas implémentés avec le transport pseudo-déterministe dans le code Phoebe au cours de ce travail, notamment à cause de l'incompatibilité décrite ci-après avec la méthode choisie pour la gestion des particules secondaires.

Hauteur d'impulsion et particules secondaires

Nous venons de voir que, lorsque la variable aléatoire étudiée peut s'exprimer comme la somme des contributions de la particule initiale et des particules secondaires créées par la diffusion, alors il est possible de suivre uniquement les particules secondaires créées par le photon complémentaire sans introduire de biais dans l'estimation. Dans le cas de la hauteur d'impulsion, à nouveau, la fonction g^{pulse} n'est pas une somme des contributions de ces particules mais une fonction de cette somme. En reprenant les notations précédentes, pour un intervalle B_i , elle peut ainsi s'écrire :

$$g^{pulse}(X_0, \Omega, X_p, X_s) = \mathbb{1}_{B_i}(h_0(X_0) + h(\Omega, X_p) + h'(\Omega, X_s)) \quad (156)$$

Dans ce cas, il n'est pas possible d'appliquer le traitement décrit en 4.6.2 où les contributions des particules primaires et secondaires sont dissociées. Ainsi, même si les énergies déposées par le photon déterministe et le photon complémentaire étaient comptabilisées indépendamment tel que décrit dans le paragraphe précédent, le choix du traitement des particules secondaires ne permet pas d'utiliser sans biais le transport pseudo-déterministe pour estimer une hauteur d'impulsion. Il serait alors nécessaire de suivre les particules secondaires associées à chaque photon, de pondérer la contribution de celles associées au photon déterministe, et d'annuler la contribution de celles associées au photon complémentaire s'il entre dans la sphère.

Estimation d'un spectre en énergie

L'estimation d'un spectre en énergie consiste à obtenir une estimation de la distribution des énergies des particules entrant dans une région donnée. De manière similaire à la hauteur d'impulsion, plusieurs intervalles en énergie sont définis et correspondent chacun à une estimation. On comptabilise ensuite, au cours d'une histoire, le nombre de particules dans la région d'intérêt dont l'énergie est comprise dans chaque intervalle.

La variable aléatoire correspondante est une fonction de l'ensemble de l'histoire d'une particule, qui comprend également l'histoire de chaque particule secondaire. Comme nous avons vu en 3.3, ce type de variables aléatoires peut s'écrire comme une fonction des variables Ω et X qui représentent la direction de diffusion et le pas après une diffusion quelconque au cours de l'histoire, et de X_0 et X_n qui représentent tous les processus précédant et suivant la diffusion. On a ainsi :

$$Y^{spectre} = h^{spectre}(X_0, \Omega, X, X_n) \quad (157)$$

Dans le cas du spectre, la quantité comptabilisée est, comme pour la dose, la somme des contributions obtenues avant et après la diffusion. Elle peut donc s'exprimer comme :

$$Y^{spectre} = g_0^{spectre}(X_0) + g^{spectre}(\Omega, X, X_n) \quad (158)$$

$$= Y_0^{spectre} + Y \quad (159)$$

Ainsi, la variable Y peut être remplacée par :

$$Y_{pseudo-det} = Y_D + Y_C \quad (160)$$

$$= g^{spectre}(\Omega^*, X, X_n)_{|X \in A} P(X \in A | \Omega = \Omega^*) \frac{f(\Omega^*)}{f^*(\Omega^*)} \quad (161)$$

$$+ g^{spectre}(\Omega', X', X'_n) [\mathbb{1}_S(\Omega') \mathbb{1}_{\bar{A}}(X') + \mathbb{1}_{\bar{S}}(\Omega')]$$

La fonction $g^{spectre}$ apparaît alors deux fois, et une réalisation de la variable $Y_{pseudo-det}$ est la somme de deux contributions. On obtient finalement :

$$Y_{pseudo-det}^{spectre} = Y_0^{spectre} + Y_D + Y_C \quad (162)$$

Le nombre de particules comptabilisées dans un intervalle en énergie B_i est la somme de :

- 1 pour toutes les particules comptabilisées avant la diffusion,
- 1 pour la particule complémentaire et les particules issues de la suite de son histoire, sauf si elle entre dans la sphère au cours du pas suivant l'application du transport pseudo-déterministe,
- Une contribution pondérée pour la particule déterministe et les particules issues de son histoire.

Bien sûr, ces trois contributions ne sont prises en compte que si la particule en question entre dans la région où l'estimation est réalisée avec une énergie comprise dans l'intervalle B_i .

L'estimation du spectre se fait généralement en comptabilisant indépendamment chaque particule entrant dans la région d'estimation. Dans le cas où le transport pseudo-déterministe est utilisé, cette démarche permet d'obtenir naturellement une estimation sans biais, puisque les contributions des particules déterministes et complémentaires sont automatiquement comptabilisées séparément.

Enfin, la fonction $g^{spectre}$ peut s'écrire comme une somme des contributions de la particule initiale et des particules secondaires créées après une diffusion :

$$g^{spectre}(X_0, \Omega, X_p, X_s) = h_0(X_0) + h(\Omega, X_p) + h'(\Omega, X_s) \quad (163)$$

De même que pour l'estimation d'une dose, il est donc possible ici de suivre de manière analogue les particules secondaires créées par la diffusion complémentaire, comme décrit en 4.6.2.

4.7 Conclusion

Parmi les nombreuses méthodes de réductions de variance existantes, le transport pseudo-déterministe semble être l'une des plus adaptées à l'accélération du calcul de la dose hors-champ, car elle permet non seulement de rediriger des particules vers des régions éloignées du champ, mais également de les y transporter sans interaction. Elle pourrait éventuellement, de plus, être combinée avec d'autres techniques d'accélération en s'assurant que l'espérance est conservée.

Nous avons vu que la méthode peut être appliquée lors de n'importe quelle diffusion au cours du transport d'un photon. Elle peut donc également l'être pour l'ensemble d'entre elles, permettant d'envoyer un nombre conséquent de particules vers la région d'intérêt. La

construction proposée ensuite pour la méthode permet non seulement de mieux appréhender ses différents constituants (partitionnement, conditionnement et échantillonnage préférentiel) et leur complémentarité, mais également de déterminer dans quelles conditions elle peut être employée. Notamment, le choix de suivre de manière analogue les particules secondaires issues de la diffusion peut contraindre les estimations possibles.

Enfin, la marche à suivre pour appliquer la méthode est maintenant exhaustive : nous avons déterminé quand la méthode peut être appliquée, quelles particules sont suivies et avec quel poids, à quelle condition le photon complémentaire est tué, comment est échantillonné l'angle de diffusion du photon déterministe, et, enfin, comment sont simulées les particules secondaires. La clarification de toutes ces procédures permet d'élaborer l'algorithme à utiliser pour l'implémentation de la méthode dans un code de simulation, ce qui fait l'objet du chapitre suivant.

5 Implémentation de la méthode dans le code Phoebe

5.1 Introduction

Après une clarification de la méthode du transport pseudo-déterministe, son utilisation pour le calcul de dose hors-champ en radiothérapie nécessite son implémentation dans un code de simulation Monte-Carlo. Ce chapitre détaille d'abord les raisons qui ont présidé au choix du code sélectionné, Phoebe, puis donne une brève description de son fonctionnement, en particulier de son algorithme de transport des particules. Celui-ci, qui se présente dans le programme sous la forme d'une boucle qui simule lors de chaque itération l'histoire complète d'une particule, utilise un ensemble de fonctions destinées à l'échantillonnage des interactions et des distances parcourues entre celles-ci.

Le choix d'implémentation demande de modifier ses deux fonctions principales, appelées `interact` et `jump`, pour permettre respectivement la création des particules déterministes et leur transport jusqu'à la sphère. Dans un second temps, ce chapitre donne donc une description détaillée de l'algorithme d'implémentation de la méthode. Elle est séparée en deux parties : la première décrit comment les modifications apportées permettent le transport des particules déterministes et complémentaires, puis la seconde détaille la création de la particule déterministe, et notamment l'échantillonnage de sa direction et de son énergie suivant le type de diffusion ayant lieu.

5.2 Le code Monte-Carlo Phoebe

5.2.1 Présentation générale du code

Le code Phoebe (*PHOton and Electron BEams*) est un code de simulation Monte-Carlo développé depuis 2013 au *Laboratoire de Modélisation, Simulation et Systèmes* du *CEA List*. Il permet le transport des photons, des électrons et des positons de quelques dizaines d'eV jusqu'au GeV et ainsi la simulation de l'ensemble d'une cascade électromagnétique. Pour cela, il reprend les modèles physiques utilisés par PENELOPE. Notamment, le code a recours au pivot aléatoire (« *random hinge*») pour le transport des électrons, et implémente la diffusion multiple de classe II (voir la partie 5.3.2 concernant l'échantillonnage du pas des particules).

Phoebe est capable de lire les fichiers d'entrée de PENELOPE et peut donc s'y substituer, rendant son emploi transparent pour les utilisateurs de PENELOPE. Il possède néanmoins des fonctionnalités supplémentaires, qui sont accessibles via un fichier d'entrée en format `.json` dont la structure est propre à Phoebe, et qui vient remplacer le fichier d'entrée au format de PENELOPE habituellement utilisé. Le code est presque entièrement écrit en C++ et est conçu pour être facilement portable ; il peut notamment être compilé et utilisé sous Windows, Linux ou MacOS. Les calculs peuvent être distribués sur plusieurs processeurs via l'utilisation de la bibliothèque *Message Passing Interface* (MPI) et permet ainsi de tirer parti de la puissance offerte par les clusters de calcul.

Finalement, Phoebe est construit de façon à être modulaire, à la différence de PENELOPE qui est entièrement compris dans quelques fichiers sources. Il possède ainsi une structure qui facilite l'ajout de fonctionnalités et de développements tels que celui entrepris dans ce travail.

5.2.2 Choix du code Phoebe

La modularité de Phoebe est l'un des principaux critères qui motivent le choix de ce code. La technique du transport pseudo-déterministe demande en effet de modifier des éléments essentiels du transport des particules, mais il est nécessaire de pouvoir l'implémenter sans altérer les sections du code ayant la charge du transport analogue. Ce serait le cas, par exemple, d'une implémentation dans un code monolithique tel que PENELOPE. Le risque d'erreurs serait alors plus élevé et elles seraient susceptibles d'impacter le transport des particules en l'absence de réduction de variance. À l'inverse, dans un code tel que Phoebe, la méthode peut être presque entièrement contenue dans un fichier indépendant qui sera utilisé par le reste du code seulement si l'utilisateur souhaite y recourir.

Le code est, de plus, bien connu par le laboratoire d'accueil de la thèse puisqu'il y est développé et utilisé. En outre, de nombreux développements, à l'origine destinés à l'usage du laboratoire, y ont été implémentés ou sont en cours d'implémentation. Il s'agit notamment de la parallélisation du code, de l'ajout de modèles de sources virtuelles, et de l'utilisation de géométries voxélisées en complément des géométries analytiques. Certains d'entre eux pourront être, par la suite, utilisés en addition au transport pseudo-déterministe.

Enfin, l'adoption dans le code des modèles physiques de PENELOPE est un facteur décisif. Comme mentionné précédemment en 4.2, bien que le transport pseudo-déterministe soit implémenté dans MCNPX, les modèles physiques utilisés par ce dernier ne sont pas aussi précis que ceux de PENELOPE pour les basses énergies et peuvent mener à des résultats inexacts. En revanche, PENELOPE étant reconnu comme une référence pour ce type de calculs, Phoebe devrait être, par construction, tout aussi adapté.

5.2.3 Utilisation et fichier d'entrée

Phoebe s'utilise via un fichier exécutable, auquel un fichier d'entrée au format `.json` est donné en seul argument. Ce dernier contient plusieurs catégories définissant la totalité des paramètres de simulation.

Catégorie **Job**

Cette catégorie contient les caractéristiques de la simulation, appelée *job*. On y précise notamment le nombre d'histoires à simuler, le temps maximum imparti au calcul, la fréquence de l'écriture des résultats partiels (appelée *dump*) et la nomenclature des fichiers de sortie.

Deux paramètres concernent la reproductibilité des simulations : `UniformSeed` permet de sélectionner la *seed* du générateur de nombres pseudo-aléatoires (voir la partie 2.4.1), et `ReproducibleIndex` contraint la reproductibilité pour les calculs en parallèle.

Catégorie **Source**

Il s'agit de la définition de la source de rayonnements. Trois types de sources sont possibles, pour les électrons, photons, ou positons : source ponctuelle, source circulaire, ou PSF (*Phase Space File*). Le PSF est un fichier dans lequel est stocké l'état d'un certain nombre de particules. Par exemple, en radiothérapie, on pourra enregistrer dans un PSF les particules émises en sortie d'un accélérateur dans une configuration donnée. Ce fichier pourra ensuite

servir de source pour un calcul de dose sur de nombreux patients différents, pour cette même configuration de l'accélérateur. Cela évite de transporter les particules dans l'accélérateur à chaque simulation et peut permettre un gain de temps important. L'énergie de la source, quant à elle, peut être constante ou échantillonnée à partir d'un spectre.

Catégorie GeometryConfiguration

Cette section contient le nom du fichier donnant la définition de la géométrie du problème. Ce fichier utilise la syntaxe du package *Pengeom* de PENELOPE où les volumes sont délimités par des surfaces quadriques. La géométrie est organisée en *bodies* (entités géométriques) formant des *modules* remplis chacun d'un unique matériau. Elle peut être visualisée à l'aide d'un utilitaire contenu dans *Pengeom*.

Catégorie Materials

Materials concerne les matériaux utilisés dans la simulation. Le fichier contenant les données des matériaux doit être fourni au format utilisé par le code *PENELOPE 2006*. Les paramètres de simulation de chaque matériau sont donnés par la suite : énergies d'absorption pour chaque type de particule (seuil d'énergie sous lequel on considère que la particule est absorbée par le milieu), seuil en énergie pour les histoires condensées (voir 5.3.2), etc.

Catégorie Detectors

Cette partie correspond aux détecteurs de la simulation. Chaque détecteur (ou *tally* dans d'autres codes) correspond à une estimation d'une ou plusieurs quantités physiques. Au cours de la simulation, il recueille les réalisations de la variable aléatoire correspondante et donne, à la fin de la simulation, le résultat demandé (par exemple, une estimation de son espérance). On y trouve notamment : l'énergie moyenne déposée dans un ou plusieurs modules, la distribution en énergie des particules entrant dans un détecteur, les cartes de dose...

Catégorie LocalSimulationParameters

Par défaut, les paramètres de simulation sont définis pour un matériau donné, où qu'il se trouve dans la géométrie. Cette section optionnelle est utilisée pour préciser des paramètres de simulation locaux, spécifiques à certains modules de la géométrie.

Catégorie TransportationHooks

Les *hooks* sont des fonctions appelées au cours du transport d'une particule, permettant d'appliquer des techniques de réduction de variance qui ne nécessitent pas de modifier directement les processus physiques en jeu. Il s'agit ici de la roulette russe et du splitting circulaire.

Catégorie **AlternativeProcesses**

Cette section contient les paramètres des techniques de réduction de variance qui demandent de modifier directement les processus physiques (par exemple l'échantillonnage du pas ou d'une interaction particulière). Lorsqu'une méthode demande de modifier un processus, la classe correspondante est remplacée par celle contenant la réduction de variance. Ainsi, lorsque le processus en question a lieu, la version contenant la réduction de variance est appliquée à la place de la version analogue. On y trouve :

- Le *Bremsstrahlung Renforcé*, qui est une modification de l'interaction de bremsstrahlung des électrons dans laquelle la probabilité d'émission d'un photon vers une région donnée peut être augmentée artificiellement. Son implémentation correspond ici à une définition alternative du processus de bremsstrahlung, qui vient alors remplacer la définition analogue lorsque la méthode est activée.
- Les interactions renforcées (*Reinforced Interactions*), qui permettent d'augmenter la probabilité d'un type d'interaction par rapport aux autres, en conservant la probabilité d'interaction totale.
- Le *Passage Splitting* sépare une particule en deux à l'entrée d'un module, via un partitionnement du pas parcouru. Une première particule interagit nécessairement à l'intérieur de ce module, tandis que la seconde le traverse entièrement.

L'implémentation du transport pseudo-déterministe est ici similaire, puisqu'il s'agit d'un processus alternatif touchant à la fois l'échantillonnage des interactions pour le choix de la direction d'émission du photon et l'échantillonnage du pas pour le transport jusqu'à la sphère. Une nouvelle classe décrit ainsi les processus modifiés nécessaires pour inclure la réduction de variance dans le transport des particules. Elle remplace tous les processus analogues du photon lorsque la technique est demandée par l'utilisateur dans le fichier d'entrée. Par défaut, la simulation se fait sans le transport pseudo-déterministe et celui-ci n'a alors aucune influence. L'algorithme et les détails de l'implémentation sont discutés en partie 5.4, après une description préalable du transport des particules en situation analogue dans Phoebe.

5.3 Transport des particules dans le code Phoebe

5.3.1 Boucle principale du code

Généralités

L'algorithme de transport de Phoebe est essentiellement organisé autour d'une boucle permettant de transporter une particule quelconque. Il commence par l'initialisation d'un objet `Particule`, puis l'appel des fonctions successives de la boucle simule les interactions et les déplacements de la particule dans la matière. La particule sur laquelle agit la boucle principale sera appelée ici «particule courante». Les fonctions utilisées sont les mêmes que soit la particule suivie (puisque l'algorithme nécessaire pour les transporter est identique), mais elles agissent différemment selon le type de la particule courante. Par exemple, la fonction

sélectionnant une interaction subie par une particule pourra choisir seulement parmi les interactions possibles pour ce type de particule.

Une particule directement émise par la source est une particule primaire. Au cours de son transport, ses interactions peuvent causer la création de particules secondaires, qui sont alors stockées dans une *pile* dans l'ordre de leur création. Lorsque le transport de la particule primaire est terminé, la particule secondaire la plus ancienne est sortie de la pile et devient la particule courante. Elle suit alors la boucle de transport et elle peut, à son tour, produire des particules secondaires qui seront stockées et suivies plus tard. Un exemple est donné sur la figure 36 ci-dessous.

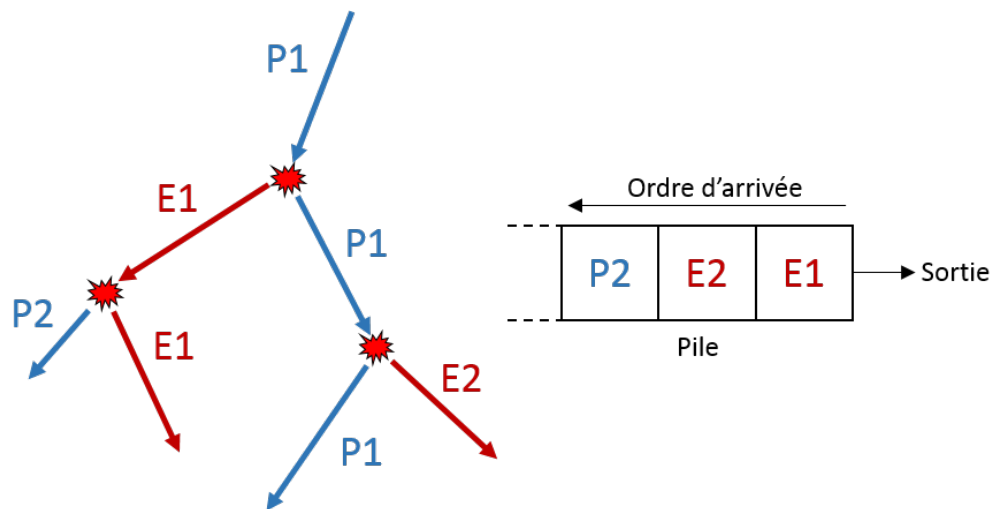


FIGURE 36 – Exemple de suivi de particules secondaires. Ici, les interactions du photon primaire P1 créent les électrons secondaires E1 puis E2. L'électron E1 est suivi en premier, et produit le photon P2. Celui-ci ne sera cependant suivi qu'après l'électron E2.

L'ensemble du suivi d'une particule primaire et de toutes les particules secondaires créées sera appelé ici *shower*. Lorsque la pile de particules secondaires est vide, la shower se termine et une nouvelle particule primaire est initialisée. Un passage de la boucle complète correspond ainsi à la simulation d'une shower. Pour les détecteurs estimant une moyenne par particule source, les quantités recueillies au cours d'une shower correspondent à une réalisation de la variable étudiée.

Détail de l'algorithme de transport

Ci-après, la figure 37 donne une version simplifiée de l'algorithme de la boucle principale de Phoebé. La correspondance avec les différentes étapes de l'algorithme est donnée par la suite entre parenthèses.

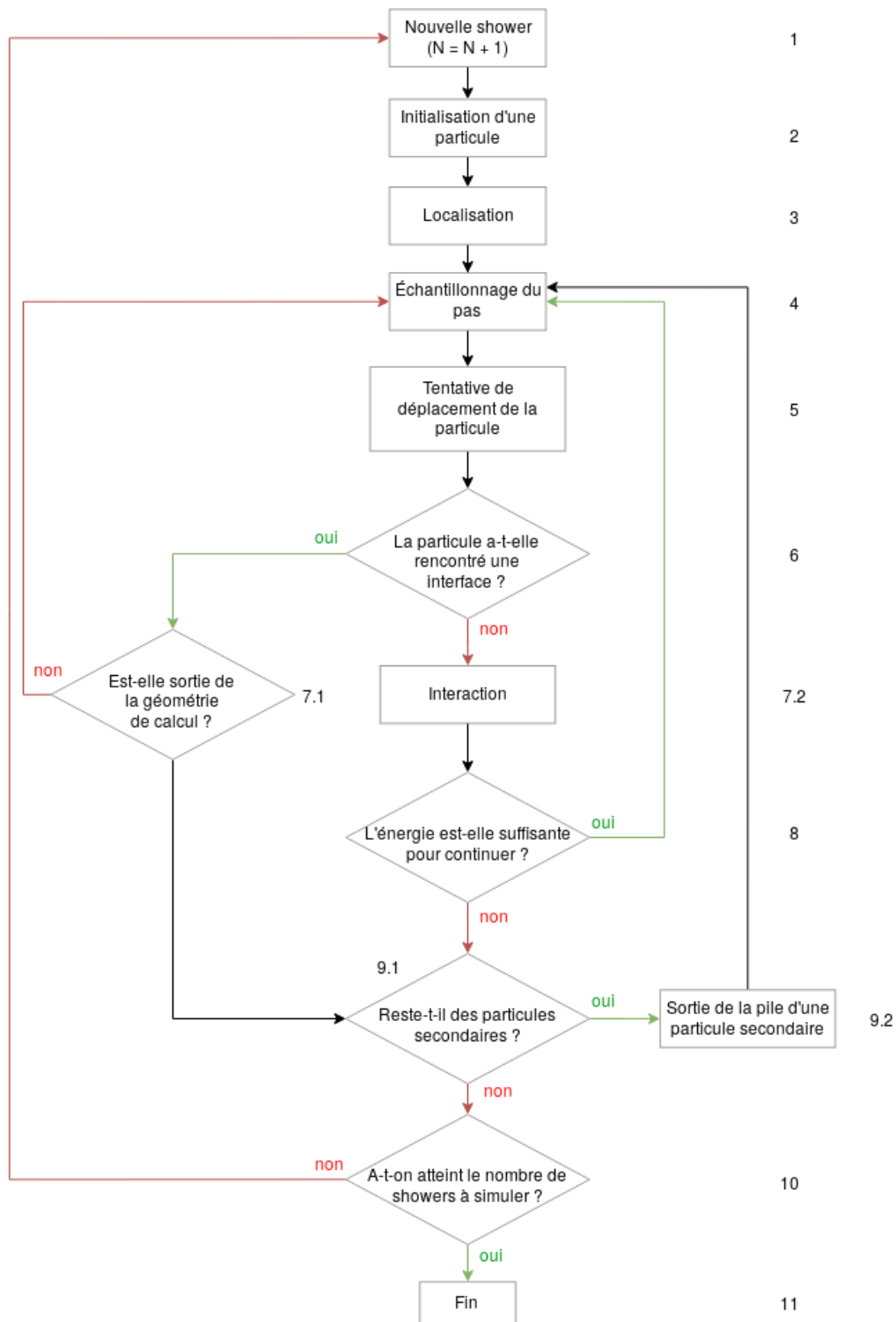


FIGURE 37 – Diagramme simplifié de la boucle de transport du code Phoebe.

L'algorithme de transport débute par l'incrément du nombre de *showers* simulées (1) et l'initialisation d'une nouvelle particule courante (2), dont les caractéristiques sont échantillonnées selon les paramètres donnés par l'utilisateur pour la source de rayonnements. Cette particule est ensuite localisée (3) par la partie du code responsable de la géométrie : en fonction de la position de la particule, elle détermine son module d'appartenance et le

matériau dans lequel elle évolue.

Cette étape permet ensuite à la fonction `jump` d'échantillonner le pas dS que va parcourir la particule (4), qui dépend à la fois de son énergie et des caractéristiques physiques du milieu environnant. L'échantillonnage du pas est détaillé dans la partie 5.3.2.

Une tentative de déplacement de la particule est ensuite effectuée (fonction `step`, (5)). Si le pas est suffisant pour que la particule sorte du module dans lequel elle se trouve, elle est placée à la limite de celui-ci et est arrêtée avant d'avoir parcouru la totalité du pas dS . Si sa sortie du module correspond à une sortie de la géométrie de calcul, la particule est abandonnée et la prochaine particule est suivie (7.1 vers 9.1). Sinon, un nouveau pas est échantillonné dans le nouveau module (7.1 vers 4). Cette boucle interne continue jusqu'à ce que la particule ne sorte pas de son module à l'issue d'un pas. Elle est alors déplacée d'une distance dS dans sa direction et interagit (6 vers 7.2). Le processus d'interaction est détaillé dans la partie 5.3.3.

Après l'interaction, la particule peut éventuellement avoir perdu une partie ou la totalité de son énergie et l'énergie restante doit être contrôlée (8). Si elle est suffisante, la particule continue son transport et un nouveau pas est échantillonné (8 vers 4). Sinon, si l'énergie de la particule passe sous son énergie d'absorption, elle est considérée comme absorbée par le milieu et son énergie restante est déposée sur le lieu d'interaction. Elle est comptabilisée par d'éventuels détecteurs, puis une nouvelle particule courante est initialisée (8 vers 9.1).

S'il reste des particules dans la pile (9.1), la plus ancienne en est sortie pour être suivie et la boucle interne commence avec l'échantillonnage du pas à parcourir (9.2 vers 4). Sinon, la shower est terminée : on vérifie alors si le nombre de showers a atteint la valeur souhaitée (10). Si ce nombre n'est pas atteint, une nouvelle shower débute (10 vers 1); sinon, la simulation se termine (11).

5.3.2 Échantillonnage du pas

Photons

La distance parcourue au cours d'un pas est aléatoire, et dépend à la fois des caractéristiques du milieu d'évolution et de l'énergie de la particule. Plus le nombre N d'atomes par unité de volume est élevé, et plus il est probable que le photon interagisse avec l'un d'entre eux au cours d'un déplacement. À chaque valeur d'énergie du photon correspond également une section efficace d'interaction σ , qui est sa probabilité d'interaction avec un atome donné. La probabilité d'interaction par unité de distance traversée par la particule est ainsi égale à σN .

La densité de probabilité de la variable aléatoire donnant la distance dS parcourue au cours d'un pas est donnée par :

$$f(dS) = \sigma N e^{-\sigma N dS} \quad (164)$$

L'échantillonnage de cette variable suivant cette distribution exponentielle peut être réalisé à l'aide de la méthode de la transformation inverse [Salvat *et al.*, 2014]. On obtient alors :

$$dS = \frac{-\ln r}{\sigma N} \quad (165)$$

où r est un nombre aléatoire tiré uniformément sur $[0; 1]$.

Le pas peut ainsi être échantillonné et la particule déplacée d'une distance dS dans sa direction. Toutefois, la distance dS étant potentiellement infinie, il est possible que la particule

change de module au cours du pas. L'équation 165 n'est alors plus valable, puisque le nouveau milieu (et donc σN) peut être différent de celui dans lequel le pas a été échantillonné. C'est pour cette raison que le photon est arrêté, sans réellement interagir, à l'entrée du nouveau module, avant de réaliser un nouvel échantillonnage du pas avec les caractéristiques du nouveau milieu.

Électrons et positons

À cause de leurs propriétés physiques similaires, le transport des électrons et des positons est traité de la même manière. Il diffère cependant de celui des photons, notamment par l'utilisation de la diffusion multiple. La probabilité d'interaction des électrons par unité de distance parcourue est en effet, en raison de leur charge électrique, bien plus élevée que celle des photons; de plus, les électrons interagissent principalement par diffusion élastique et la perte d'énergie moyenne par interaction est très faible. En conséquence, le suivi classique d'un électron jusqu'à son absorption demande un nombre très élevé d'échantillonnages et donc un temps de calcul extrêmement important en comparaison d'un photon.

Ce problème a donné naissance à diverses méthodes dites d'histoires condensées, dans lesquelles certaines interactions des électrons sont regroupées en un seul événement pour gagner en temps de calcul, au prix d'une légère diminution de la fidélité du transport. À l'origine, elle ne prennent pas en compte la perte d'énergie de l'électron et sont donc efficaces surtout à basse énergie (inférieure à quelques dizaines de keV) lorsque la majorité des diffusions sont élastiques. En revanche, pour des énergies plus élevées pour lesquelles les interactions inélastiques sont plus nombreuses, il est nécessaire de prendre en compte la variation d'énergie de l'électron. Pour cela, les techniques d'histoires condensées ont été développées à partir de la diffusion multiple [Berger, 1963] [Hebbard and Wilson, 1955]. Ces méthodes tiennent compte de la perte d'énergie et de la création des particules secondaires au cours des diffusions et sont donc plus précises lorsque l'énergie augmente.

Il existe deux classes d'histoires condensées, traitant chacune la diffusion multiple d'une manière différente : la classe I regroupe toutes les interactions subies par l'électron, tandis que la classe II regroupe uniquement celles pour lesquelles la perte d'énergie et la déviation sont faibles. Les autres interactions sont traitées de manière classique sans être regroupées. C'est cette seconde classe qui est utilisée dans Phoebé, dans lequel le seuil entre ces deux catégories d'interactions est réglé à l'aide d'un paramètre du fichier de configuration. Les histoires condensées de classe II sont généralement considérées comme plus précises que celles de classe I, notamment aux interfaces entre les matériaux.

En plus de l'histoire condensée, Phoebé reprend la méthode du *random hinge* de PENELOPE [Fernández-Varea *et al.*, 1993], illustrée sur la figure 38.

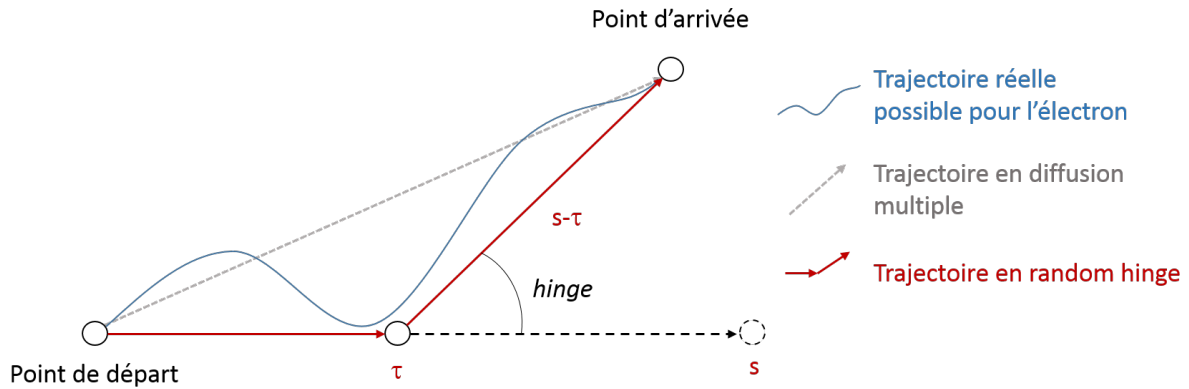


FIGURE 38 – Illustration du principe de la méthode du *random hinge*. L'électron continue sa trajectoire en ligne droite avant de subir une diffusion ou *hinge*, puis termine son pas.

Au lieu d'être diffusée à la fin d'un pas condensé (durant lequel on considère que l'électron se déplace en ligne droite), la particule continue d'abord son chemin dans sa direction d'origine. La distance τ ainsi parcourue est échantillonnée uniformément entre 0 et la valeur du pas condensé s . Lorsqu'il atteint cette distance, l'électron est dévié de manière à conserver la distribution angulaire donnée par la diffusion multiple, puis parcourt une distance $s - \tau$ en ligne droite. La diffusion a donc lieu à un point aléatoire au cours du pas, plutôt qu'à la fin de celui-ci [Franke *et al.*, 2013]. Cette méthode permet d'obtenir un dépôt d'énergie latéral plus réaliste, et donne une grande fiabilité à la simulation pour les faibles énergies.

5.3.3 Choix et réalisation d'une interaction

Choix de l'interaction

Lorsqu'une particule effectue un pas sans avoir rencontré d'interface, une interaction doit avoir lieu. Il est d'abord nécessaire de sélectionner une interaction parmi celles que peut subir la particule courante.

La section efficace totale d'interaction σ est la somme des sections efficaces relatives σ_i des J interactions possibles :

$$\sigma = \sum_{i=1}^J \sigma_i \quad (166)$$

La variable aléatoire donnant le type d'interaction, sachant qu'une interaction a lieu, a ici une distribution discrète. Elle peut prendre J valeurs pour les J interactions possibles, chacune avec une probabilité :

$$P(i) = \frac{\sigma_i}{\sigma} \quad (167)$$

À nouveau, le choix d'une interaction peut être réalisé à l'aide de la méthode de la transformation inverse [Salvat *et al.*, 2014]. L'interaction i obtenue dépend directement de la

valeur d'un nombre pseudo-aléatoire r tiré uniformément sur $[0; 1]$:

$$i = 1 \text{ si } r < P(1) \quad (168)$$

$$i = 2 \text{ si } P(1) < r < P(1) + P(2) \quad (169)$$

$$i = 3 \text{ si } P(1) + P(2) < r < P(1) + P(2) + P(3) \quad (170)$$

$$\dots \quad (171)$$

$$i = k \text{ si } \sum_{i=1}^{k-1} P(i) < r < \sum_{i=1}^k P(i) \quad (172)$$

$$\dots \quad (173)$$

$$i = J \text{ si } \sum_{i=1}^{J-1} P(i) < r \quad (174)$$

$$(175)$$

Une illustration de cette procédure, pour quatre interactions possibles, est donnée sur la figure 39.

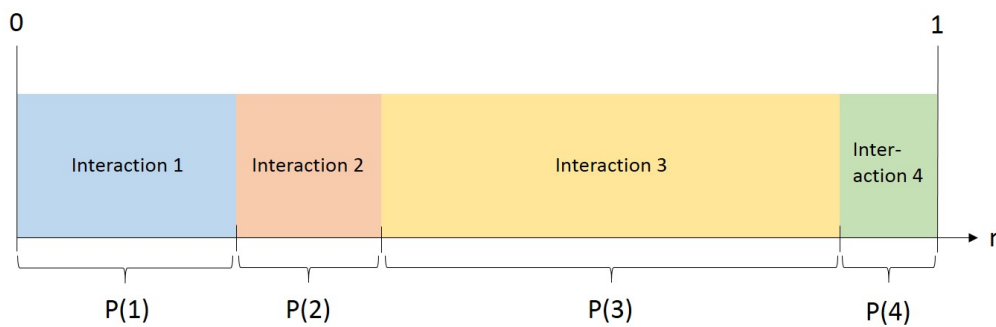


FIGURE 39 – Illustration de l'échantillonnage du choix de l'interaction. La valeur du nombre aléatoire r détermine l'interaction à réaliser.

Il est assez intuitif ici que l'échantillonnage uniforme de r sur $[0; 1]$ entraîne le choix d'une interaction en respectant leurs probabilités respectives.

Échantillonnage de l'interaction

De nombreuses interactions sont possibles, et chacune requiert un échantillonnage particulier afin de déterminer la perte d'énergie de la particule, sa déviation angulaire et les particules secondaires créées. Selon l'interaction, il peut être nécessaire d'utiliser la transformation inverse, la méthode de rejet [von Neumann, 1951], ou encore la méthode de composition. Notamment, la méthode de composition de Box-Müller [Box and Muller, 1958] est utilisée pour les distributions gaussiennes.

Tous ces échantillonnages se basent sur les sections efficaces différentielles des interactions, qui définissent chacune la distribution d'une grandeur donnée à l'issue de l'interaction. Par exemple, la section efficace différentielle en angle de la diffusion Rayleigh donne la distribution des angles de diffusion à une énergie donnée. Cette distribution

donne directement la densité de probabilité à échantillonner, éventuellement après une normalisation. Nous verrons, notamment, que la connaissance de la densité de probabilité utilisée pour le choix de l'angle lors des diffusions est essentielle au calcul de poids de la particule déterministe lors de l'application du transport pseudo-déterministe. Avant de détailler le calcul de ce poids, la partie suivante décrit l'algorithme élaboré pour l'implémentation de la méthode du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.

5.4 Algorithme d'implémentation de la méthode

5.4.1 Principe général de l'implémentation

Dans Phoebe, les différents processus de transport des photons sont gérés par la classe `StdPhotonProcesses`. Notamment, elle définit les fonctions `jump` et `interact` qui échantillonnent respectivement le pas parcouru par un photon et ses interactions. Le transport pseudo-déterministe est implémenté via l'ajout d'une classe spécialisée, basée sur `StdPhotonProcesses`, qui vient remplacer cette dernière lorsque la demande en est faite dans le fichier d'initialisation.

Cette classe possède, en particulier, une fonction supplémentaire ayant pour rôle de créer la particule déterministe. Le reste des modifications se trouve dans les fonctions `jump` et `interact`. Plus précisément, un système de statut est utilisé pour différencier les particules déterministes, complémentaires et analogues. Les fonctions `jump` et `interact` agissent alors différemment suivant le statut de la particule, de manière à correctement produire l'algorithme du transport pseudo-déterministe sans impacter le transport des photons analogues.

Lorsqu'une diffusion se produit hors de la sphère pseudo-déterministe, une particule déterministe est créée et sa direction est échantillonnée vers la sphère. Son poids peut alors être corrigé du facteur lié à l'échantillonnage non-analogue de la direction. En revanche, la probabilité de non-interaction jusqu'à son arrivée à la sphère est encore inconnue à ce stade. La particule devra d'abord être transportée pas à pas jusqu'à la sphère, sans interagir, de manière à connaître les différents matériaux traversés et les distances parcourues dans chacun d'entre eux. Pour cela, elle est stockée dans la pile de particules secondaires avec le statut *Déterministe*, qui indiquera aux fonctions `jump` et `interact` que cette particule doit être transportée en ligne droite jusqu'à la sphère sans aucune interaction. L'exponentielle correspondant à la probabilité de non-interaction sera calculée à la fin du trajet jusqu'à la sphère. La particule ayant subi la diffusion, quant à elle, voit son statut devenir *Complémentaire*. Ce dernier indique aux fonctions de transport que cette particule doit être tuée si elle entre dans la sphère durant le pas suivant l'interaction pseudo-déterministe. Finalement, les particules analogues sont transportées de la même manière qu'en l'absence de transport pseudo-déterministe.

La création de la particule déterministe nécessite de connaître l'énergie et la direction du photon d'origine. Puisque le transport pseudo-déterministe est appliqué à la suite d'une interaction, ces valeurs ont éventuellement pu être modifiées. Il est donc nécessaire d'enregistrer l'énergie et la direction de la particule analogue avant chaque interaction, même s'il ne s'agit en définitive pas d'une diffusion.

Les deux sections suivantes détaillent respectivement l'algorithme de transport de la particule déterministe, destiné à l'amener à la surface de la sphère sans interaction, puis celui

de la particule complémentaire, chargé de s'assurer qu'elle n'entre pas dans la sphère à la suite d'une diffusion.

5.4.2 Transport de la particule déterministe

Les différentes grandeurs utilisées dans cette partie sont spécifiées ci-dessous sur la figure 40, et illustrées avec une géométrie de calcul comportant trois modules. L'interaction pseudo-déterministe a lieu dans le module 1, et la sphère pseudo-déterministe se trouve entièrement dans le module 3.

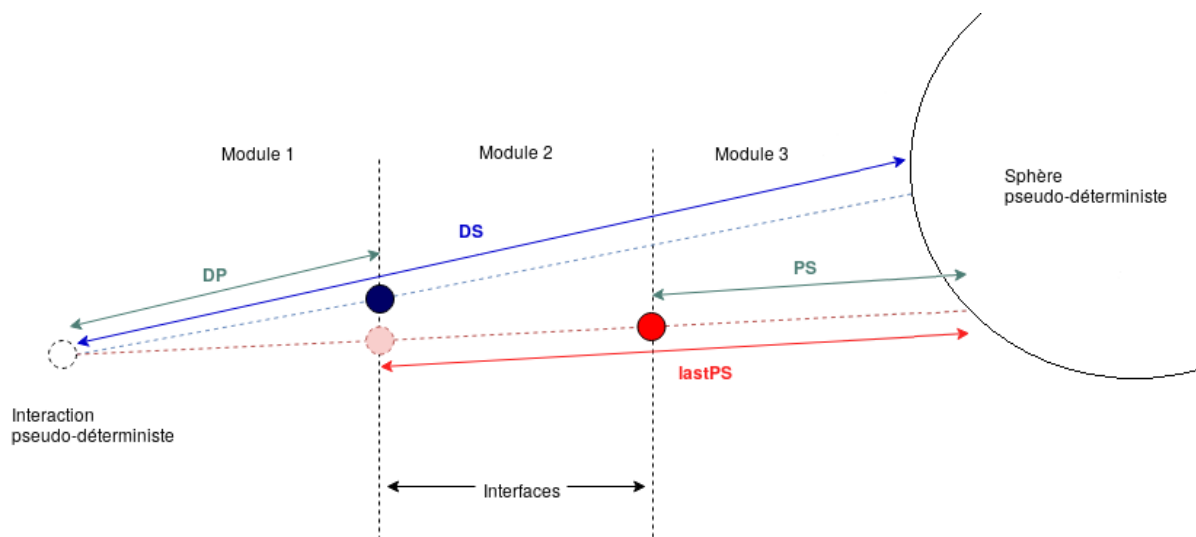


FIGURE 40 – Représentation des différentes grandeurs utilisées durant le transport de la particule déterministe et de la particule complémentaire.

La distance DP (Diffusion - Particule) correspond à la distance entre la diffusion donnant lieu à un transport pseudo-déterministe et la particule complémentaire, ici représentée en bleu. DS (Diffusion - Sphère) est la distance entre la diffusion et le point d'arrivée (éventuel) sur la sphère de la particule complémentaire. PS (Particule - Sphère) est la distance qui sépare la particule déterministe (ici en rouge, arrêtée à une interface) de son point d'arrivée sur la sphère. Finalement, une variable $lastPS$ représente la dernière distance calculée entre la particule déterministe et son point d'arrivée, en l'occurrence lorsqu'elle était arrêtée à la première interface. La différence $lastPS - PS$ donne la distance parcourue par la particule entre les deux interfaces, c'est-à-dire dans le dernier module traversé. L'algorithme de transport d'une particule déterministe est donné par la suite sur la figure 41. La correspondance avec les différentes étapes de l'algorithme est à nouveau donnée entre parenthèses.

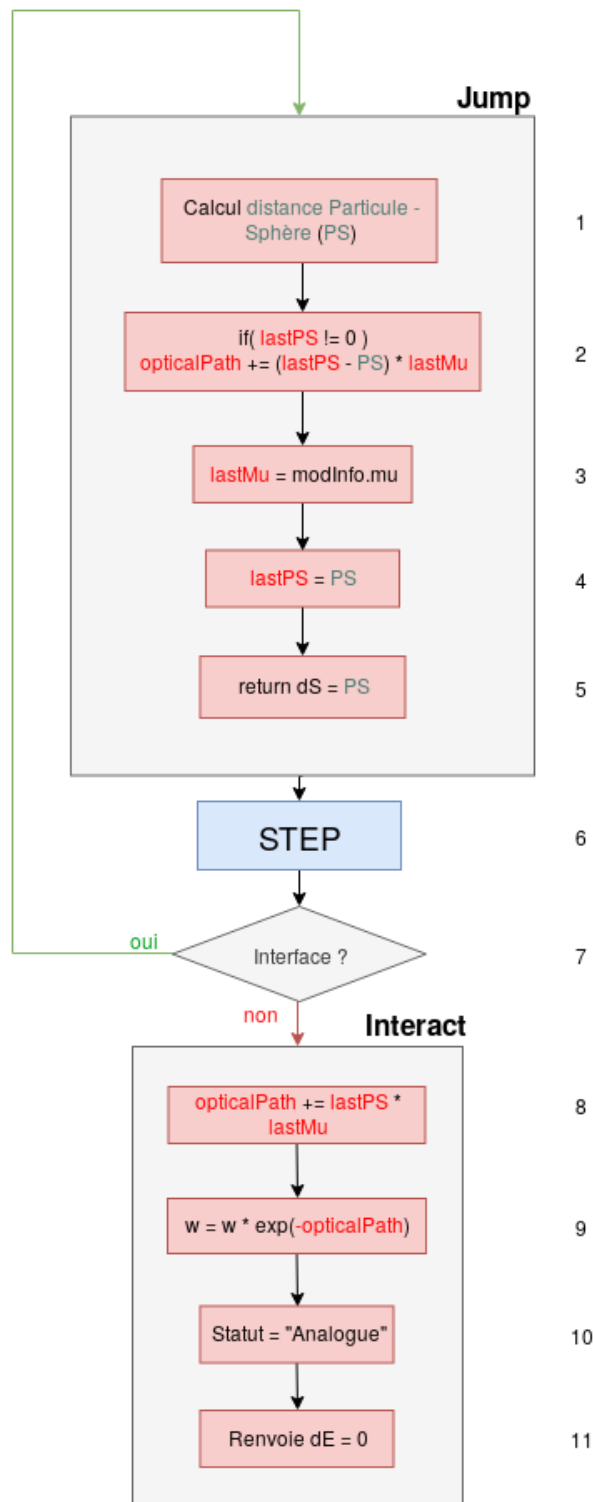


FIGURE 41 – Diagramme de la boucle de transport pour une particule déterministe.

Le transport de la particule déterministe jusqu'à la sphère a deux objectifs : le premier est de la placer à sa surface dans la direction échantillonnée, et le second est de connaître tous les matériaux traversés et la distance parcourue dans chacun d'entre eux pour calculer le chemin

optique parcouru. Pour une particule traversant i modules, on le définit comme

$$\sum_i \mu_i d_i \quad (176)$$

où μ_i est le coefficient d'atténuation linéique du module i et d_i la distance parcourue dans ce module. Cette valeur est nécessaire au calcul du poids de la particule. Elle est représentée par la variable `opticalPath`, qui est mise à jour au fur et à mesure du transport de la particule jusqu'à la sphère.

Le parcours d'une particule de statut *Déterministe* débute ainsi dans `jump` par le calcul de la distance PS qui la sépare de la sphère (1). Lors du premier `jump` de la particule, la valeur de `lastPS` vaut zéro. Celle-ci étant initialisée à zéro lorsque la particule est créée, cela signifie pour `jump` que la particule ne s'est pas encore déplacée après sa création. Le chemin optique parcouru `opticalPath` ne nécessite alors pas encore d'être mis à jour (2).

La variable `lastMu` est utilisée pour garder en mémoire le coefficient d'atténuation du module actuel (3), qui sera nécessaire pour mettre à jour le chemin optique après son prochain pas, puisque la particule pourra éventuellement être placée dans un nouveau module. La variable `lastPS` permet de conserver la distance Particule-Sphère qui vient d'être calculée (4). La fonction renvoie ensuite la valeur du pas $dS = PS$ (5). Cela signifie que la particule sera ensuite déplacée exactement à la surface de la sphère par `step`, sauf si elle rencontre une interface (6, 7). Dans ce cas, elle est placée sur cette interface et la fonction `jump` est à nouveau appelée.

La nouvelle distance PS est alors calculée (1). Cette fois-ci, `lastPS` est non-nulle et le chemin optique est donc mis à jour (2). La valeur de `lastPS - PS` donne la distance parcourue dans le module qui vient d'être traversé, et `lastMu` donne le coefficient d'atténuation correspondant. Le chemin optique est alors incrémenté de $(lastPS - PS) \times lastMu$, et les valeurs de `lastMu` et `lastPS` sont mises à jour (3, 4) avant de renvoyer la nouvelle distance PS (5). Cette opération est répétée jusqu'à ce que la particule atteigne la surface de la sphère, c'est-à-dire lorsqu'aucune interface n'est rencontrée.

Au moment où la particule atteint la sphère, `lastPS` est la dernière distance parcourue dans le dernier module rencontré. Le chemin optique peut être mis à jour une dernière fois en y ajoutant $lastPS \times lastMu$ (8). Le poids de la particule est finalement multiplié par la probabilité de non-interaction le long de son trajet (9) :

$$\exp\left(-\sum_i \mu_i d_i\right) \quad (177)$$

La particule récupère ensuite le statut *Analogue* (10) et la fonction renvoie une valeur d'énergie déposée dE nulle (11) : aucune interaction n'a eu lieu à la surface de la sphère, la particule reprend simplement un transport normal à son arrivée.

5.4.3 Transport de la particule complémentaire

L'algorithme du transport de la particule complémentaire est donné ci-dessous sur la figure 42.

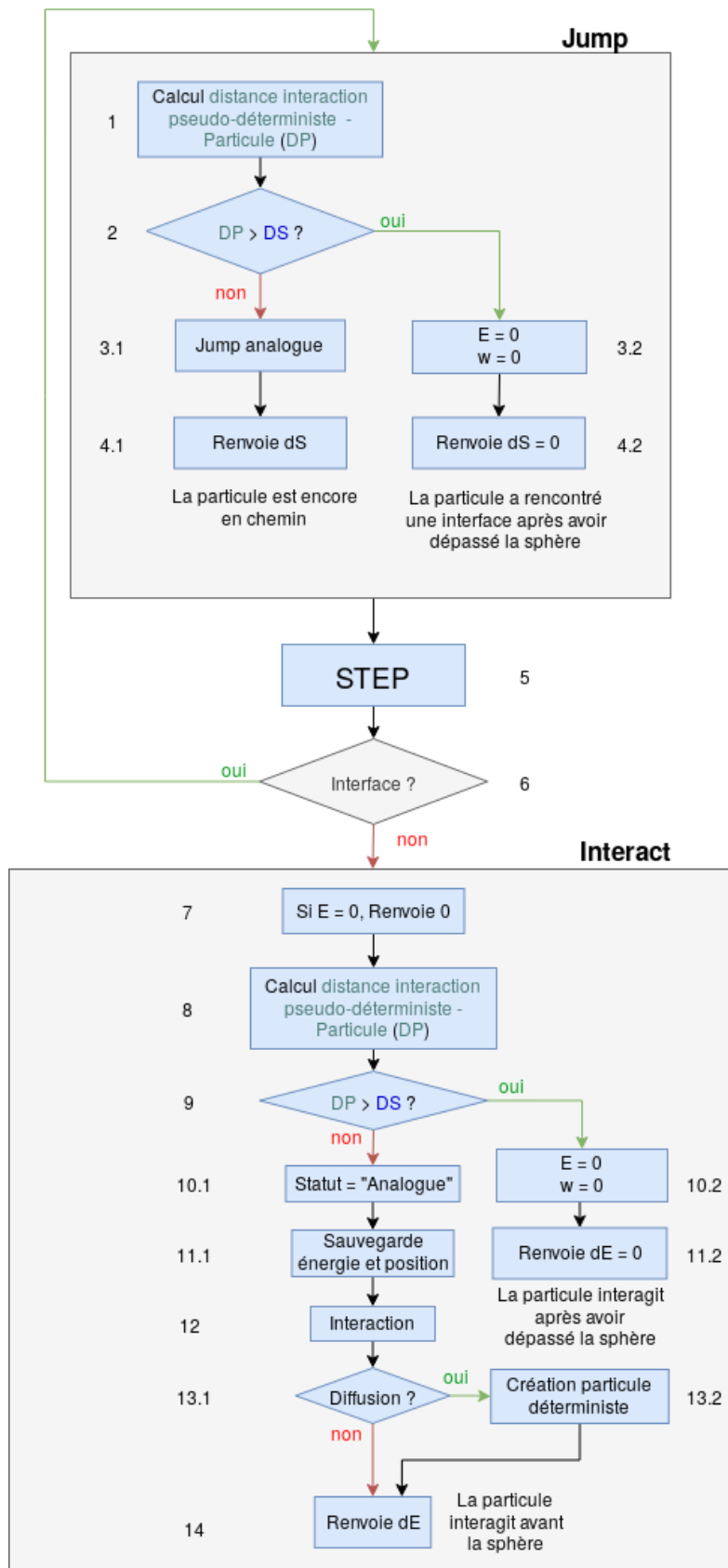


FIGURE 42 – Diagramme de la boucle de transport pour une particule complémentaire.

Pour la particule complémentaire, qui obtient son statut à la suite d'une diffusion, la prochaine étape est également l'échantillonnage du pas à parcourir. Précisons ici que cette particule n'obtient le statut *Complémentaire* que si elle est dirigée vers la sphère à la suite de la diffusion : elle ne peut, en effet, pas y entrer dans le cas contraire.

La distance DP , séparant la particule de sa dernière diffusion pseudo-déterministe, est alors calculée (1) puis comparée à la distance DS (2). La particule se déplace en ligne droite depuis la diffusion et est dirigée vers la sphère. Alors, si $DP > DS$, elle a nécessairement dépassé la surface de la sphère et elle doit être tuée (3.2). On notera qu'il serait également possible, pour déterminer si la particule est entrée dans la sphère, de calculer la distance séparant la particule du centre de la sphère, puis de la comparer à son rayon. Cette méthode ne permet cependant pas de prendre en compte le cas où la particule dépasse la sphère sans s'y arrêter (soit à une interface soit pour une interaction). Dans ce cas, la distance calculée serait tout de même supérieure au rayon alors que la particule n'est plus dirigée vers la sphère. Elle serait alors suivie sans interaction jusqu'à sa sortie de la géométrie de calcul.

Si la particule a été tuée, la fonction renvoie un pas $dS = 0$ (4.2) pour une entrée immédiate dans `interact`. Sinon, le pas est échantillonné normalement à l'aide de la fonction `jump` analogue (3.1). Cette opération est répétée à chaque interface si nécessaire, jusqu'à l'interaction de la particule (5, 6).

À l'entrée de la fonction `interact`, l'énergie de la particule est contrôlée. Elle est nulle lorsque la particule a été tuée par `jump` : dans ce cas, la fonction s'arrête et renvoie une valeur d'énergie déposée nulle (7). Cette particule ne sera ensuite plus suivie.

Dans le cas contraire, une interaction doit avoir lieu et une dernière vérification de position est réalisée (8, 9). Si la particule a dépassé la sphère, elle est tuée et la fonction `interact` renvoie $dE = 0$ (10.2, 11.2). Si elle n'a pas dépassé la sphère, son statut redevient *Analogue* (10.1), et une interaction est réalisée (12). S'il s'agit d'une diffusion, le transport pseudo-déterministe pourra à nouveau être appliqué (13.1, 13.2).

On notera que l'interaction (12) est susceptible de modifier l'énergie et la direction de la particule. Ces valeurs étant nécessaires à la création de la particule déterministe, elles sont auparavant sauvegardées (11.1). La fonction renvoie finalement l'énergie déposée par l'interaction (14).

La partie suivante donne le détail de la fonction chargée de la création de la particule déterministe. Plus précisément, elle réalise l'échantillonnage de sa direction, puis le calcul de son poids initial (facteur correctif lié à la direction d'émission) et de son énergie avant de l'inclure dans la pile de particules avec le statut *Déterministe*. Ce photon suivra ensuite le parcours de transport décrit précédemment en 5.4.2.

5.5 Fonction de création des particules déterministes

5.5.1 Vue d'ensemble de la fonction

Même si la méthode est généralement décrite comme agissant sur l'interaction de diffusion, son implémentation dans Phoebe ne nécessite pas de modifier la description de l'interaction elle-même. Dans cette implémentation, l'activation du transport pseudo-déterministe se décide après que l'interaction d'un photon a été effectuée de manière analogue. S'il s'agissait d'une diffusion ayant lieu hors de la sphère d'intérêt, alors :

- La particule actuelle devient la particule complémentaire et ne peut plus rentrer dans la sphère au cours du pas suivant,
- La particule déterministe est créée en utilisant la direction et l'énergie du photon avant son interaction, gardées en mémoire.

L'algorithme adopté est schématisé ci-dessous sur la figure 43.

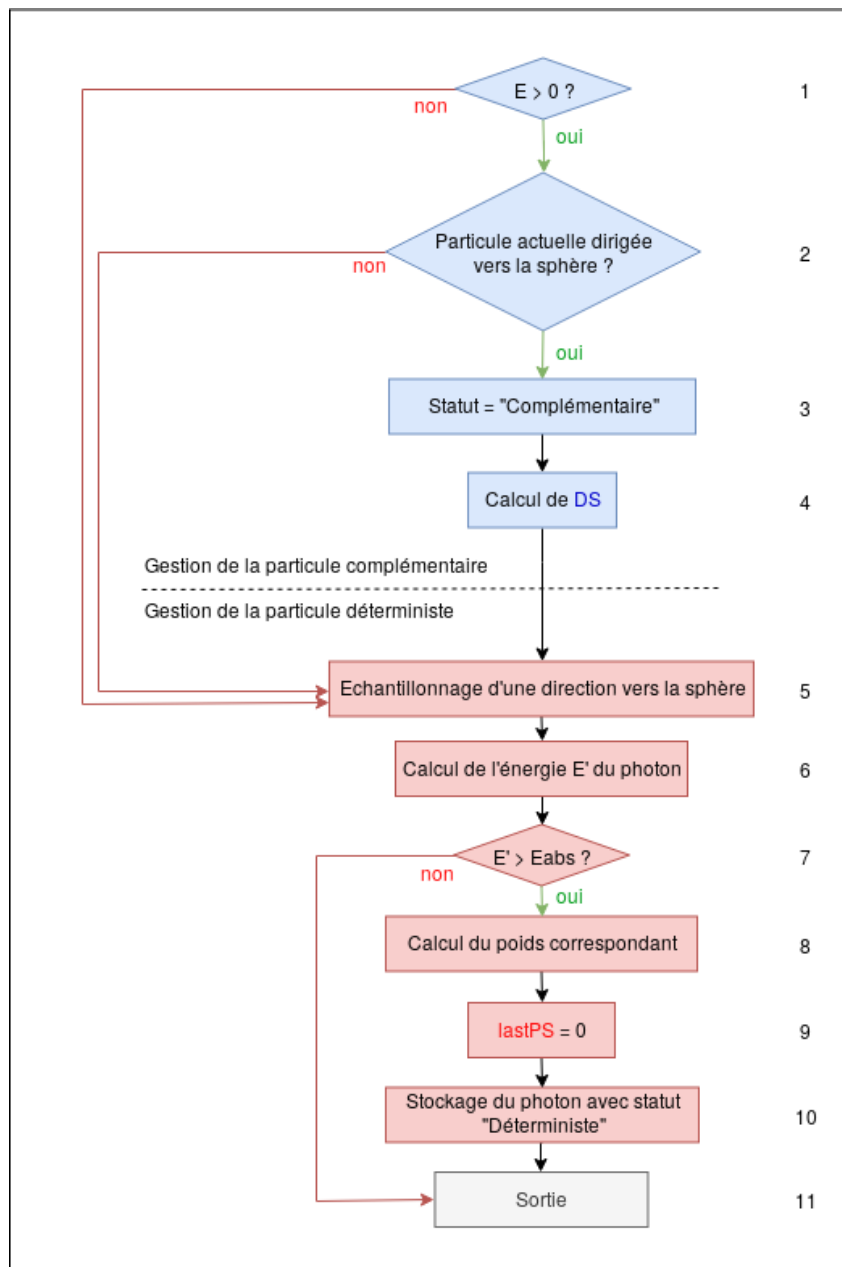


FIGURE 43 – Diagramme de la fonction chargée de l'attribution du statut "Complémentaire" à la particule actuelle et de la création de la particule déterministe.

La première partie a pour but d'attribuer, si nécessaire, le statut "Complémentaire" à la particule actuelle. La première étape est une vérification de l'énergie du photon (1). Elle peut être nulle s'il vient d'être absorbé à la suite d'une diffusion Compton. Dans ce cas, il n'est

pas nécessaire de modifier son statut et la fonction passe à l'étape de création de la particule déterministe (5 à 10). La particule déterministe est tout de même créée : puisque son énergie dépend de la direction échantillonnée, qui est différente de celle du photon complémentaire, il est possible qu'elle ne soit pas absorbée suite à l'interaction.

Si la particule n'a pas été absorbée, sa direction est contrôlée (2). En effet, si elle n'est pas dirigée vers la sphère, il est impossible qu'elle y entre sans interagir à nouveau et le changement de statut n'est pas nécessaire. Dans le cas contraire, elle est marquée comme "Complémentaire" et ne pourra pas entrer immédiatement dans la sphère (3) sans être tuée. La distance qui la sépare de la surface de la sphère, dans sa direction de diffusion, est calculée (4). Elle servira au cours de son transport pour s'assurer que la particule n'a pas dépassé la sphère (voir 5.4.3).

L'étape suivante est la création de la particule déterministe, qui sera ajoutée à la pile de particules secondaires. Elle débute par l'échantillonnage de sa direction vers la sphère (5) dont le détail est donné ci-après en 5.5.2. Une fois la direction choisie, il est possible de calculer son énergie (6). Si cette énergie est inférieure à l'énergie d'absorption du milieu dans lequel l'interaction a eu lieu, alors le photon n'est pas créé et la fonction se termine (7).

Cette annulation de la création du photon peut paraître contradictoire avec le principe de la méthode. Nous avons, en effet, affirmé que l'estimation ne sera pas biaisée si un photon déterministe atteint la sphère, et si le photon complémentaire est tué lorsqu'il l'atteint. Or, ici, l'éventuel photon complémentaire est tué s'il entre dans la sphère, bien qu'aucun photon déterministe ne soit créé. En fait, en toute rigueur, le photon complémentaire est éliminé s'il entre dans la sphère *et que son énergie est supérieure à l'énergie d'absorption du milieu*, puisqu'il est absorbé lors de la diffusion dans le cas contraire. On voit alors qu'une particule déterministe doit atteindre la sphère *seulement si son énergie est supérieure à l'énergie d'absorption du milieu*. Lorsqu'elle ne l'est pas, la particule déterministe ne doit donc pas être créée¹². La particule ne pourrait, de toute façon, pas atteindre la sphère et le dépôt de son énergie sur le lieu d'interaction serait (en moyenne) redondant avec celui des particules complémentaires absorbées.

Si, en revanche, l'énergie du photon est supérieure à l'énergie d'absorption du milieu, il sera créé et stocké dans la pile. Pour cela, son poids est d'abord multiplié par le facteur correctif lié à l'échantillonnage non-analogique de la direction de diffusion (8). La valeur de `lastPS` pour cette particule est initialisée à zéro afin d'éviter une mise à jour inutile du chemin optique par `jump` (9). Finalement, le photon déterministe est stocké dans la pile de particules avec le statut "Déterministe" et suivra les étapes de transport appropriées à sa sortie.

Durant toutes ces étapes, la particule courante reste le photon original venant de subir une diffusion. Lorsque la fonction décrite ci-dessus se termine, la fonction `interact` renvoie la valeur de l'énergie éventuellement déposée par la diffusion (étapes 13.2 et 14 sur la figure 42) et le photon continue son transport en fonction de son statut.

5.5.2 Échantillonnage de la direction et de l'énergie

Direction du photon déterministe

12. On pourrait, par exemple, imaginer qu'on élimine seulement les particules complémentaires d'énergie comprise entre 1 et 2 MeV à l'entrée de la sphère. Alors, seules les particules déterministes d'énergie comprise entre 1 et 2 MeV devraient être créées.

Pour rappel de la partie concernant l'échantillonnage de l'angle de diffusion η de la particule déterministe, la densité de probabilité de la variable que l'on cherche à échantillonner est :

$$f^*(\eta) = \begin{cases} \alpha = \frac{P(\eta \in [\eta_0; \eta_i])}{\eta_i - \eta_0} = \frac{1}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} & \text{si } \eta \in [\eta_0; \eta_i] \\ \beta = \frac{P(\eta \in [\eta_i; 1])}{1 - \eta_i} = \frac{Q}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} & \text{si } \eta \in [\eta_i; 1] \end{cases} \quad (178)$$

Où η_0 est le cosinus de l'angle entre l'axe joignant la particule au centre de la sphère et l'axe joignant la particule au bord de la sphère extérieure, et η_i est le cosinus de l'angle entre l'axe joignant la particule au centre de la sphère et l'axe joignant la particule au bord de la sphère interne (se référer à la figure 32). Q est un facteur défini par l'utilisateur. Cette fonction est représentée ci-dessous sur la figure 44.

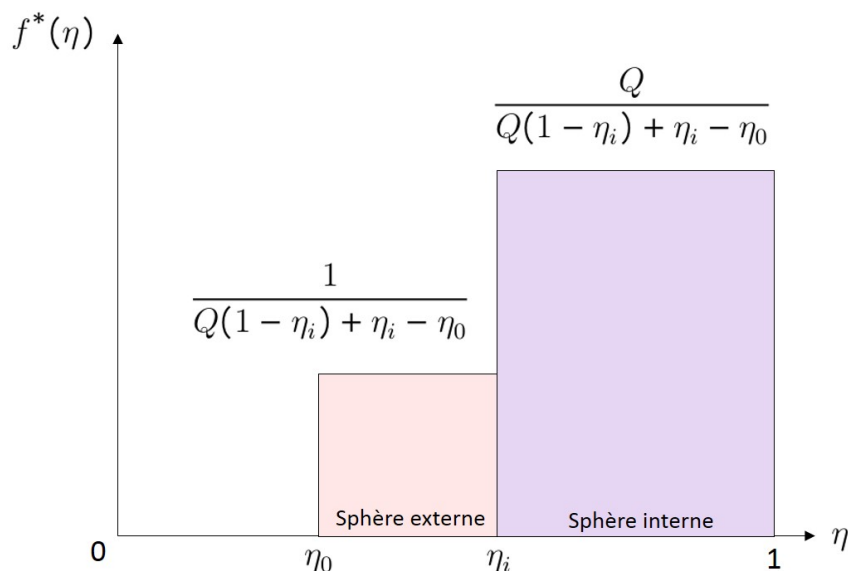


FIGURE 44 – Représentation de la densité de probabilité de la variable échantillonnée. Les paliers représentent respectivement un tirage vers la sphère externe ou vers la sphère interne. Leur hauteur dépend de la valeur de Q , tandis que la position de leur séparation dépend du rayon de la sphère interne.

Cet échantillonnage est réalisé en deux temps. Une variable U suivant une loi uniforme sur $[0; 1]$ est d'abord échantillonnée pour sélectionner la sphère interne ou la sphère externe. Puis, suivant le résultat de ce tirage, on réalise un échantillonnage de η uniquement sur l'un ou l'autre des intervalles représentés ci-dessus.

La première étape consiste donc à calculer les valeurs de η_i et η_0 à partir de la connaissance de la position de la particule et des caractéristiques de la sphère. Puis, à partir de celles-ci, on détermine la probabilité que η appartienne à la sphère interne :

$$P(\eta \in [\eta_i; 1]) = \frac{Q(1 - \eta_i)}{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0} \quad (179)$$

On réalise ensuite le tirage d'un nombre aléatoire u . Si $u < P(\eta \in [\eta_i; 1])$, l'intervalle intérieur est sélectionné et on réalise un second tirage u_1 de U . On obtient un tirage de η selon une loi uniforme sur $[\eta_i; 1]$ en calculant $\eta = u_1(1 - \eta_i) + \eta_i$.

À l'inverse, si $u > P(\eta \in [\eta_i; 1])$, l'intervalle extérieur est sélectionné et on tire un second nombre aléatoire u_2 . On obtient alors $\eta = u_2(\eta_i - \eta_0) + \eta_0$.

L'angle azimutal autour de l'axe particule - centre de la sphère est ensuite échantillonné uniformément entre 0 et 2π .

Énergie du photon déterministe

Si l'interaction était une diffusion Rayleigh, l'énergie du photon déterministe est égale à celle du photon incident (voir annexe A). Dans le cas de l'interaction Compton, on distingue deux cas selon l'énergie du photon d'origine.

Une diffusion Compton est une collision d'un photon avec un électron du milieu dans lequel il évolue. Pour un électron isolé et au repos, l'énergie du photon diffusé dépend directement de sa direction, et vaut :

$$E' = \frac{E}{1 + \kappa(1 - \eta)} \quad (180)$$

avec $\kappa = \frac{E}{m_e c^2}$ où m_e est la masse de l'électron. Or, en réalité, les électrons du milieu ne sont ni au repos, puisqu'ils se déplacent suivant une certaine distribution de quantité de mouvement; ni isolés, puisqu'ils sont liés à un atome. Ces deux considérations ont chacune une conséquence sur l'énergie du photon diffusé et sa distribution angulaire [Williamson *et al.*, 1984]. D'abord, l'éjection d'un électron n'est possible que si l'énergie perdue par le photon lors de la diffusion est supérieure à son énergie de liaison. Ensuite, le mouvement des électrons crée l'apparition d'un élargissement Doppler dans les énergies du photon diffusé. En somme, suivant la quantité de mouvement de l'électron interagissant avec le photon, l'énergie du photon diffusé pourra prendre plusieurs valeurs pour un angle de diffusion identique.

Ces deux effets sont pris en compte dans les modèles de Phoebe, dans lequel, lors d'une diffusion Compton, après le choix de l'angle de diffusion, l'énergie est calculée après la sélection aléatoire d'un électron touché parmi ceux de l'atome concerné. Inévitablement, il en est de même pour le photon déterministe : une fois l'angle échantillonné, une couche électronique est sélectionnée et l'énergie peut être calculée de la même manière que pour une interaction analogue.

Toutefois, si l'énergie E du photon d'origine est supérieure à quelques MeV, on peut considérer que l'élargissement Doppler et l'effet de liaison sont négligeables. L'énergie du photon émis est alors donnée par l'équation 180. La limite à partir de laquelle cette approximation est utilisée est fixée à 5 MeV dans Phoebe.

Une fois l'énergie calculée, le photon créé est presque prêt à être placé dans la pile de particules secondaires pour être suivi jusqu'à la sphère. Il reste pour cela à calculer son poids initial, qui sera ensuite multiplié par la probabilité de non-interaction jusqu'à la sphère à son arrivée.

5.5.3 Calcul du poids initial

Nous avons vu dans la partie 4.6.1 que le poids associé à la particule déterministe est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, \omega) ds\right) f(\mu) (Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0) \text{ si } \eta \in [\eta_0; \eta_i] \\ \exp\left(-\int_{P_0}^{P_S} \Sigma(s, \omega) ds\right) f(\mu) \frac{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0}{Q} \text{ si } \eta \in [\eta_i; 1] \end{array} \right. \quad (181)$$

L'exponentielle ne sera connue qu'à l'arrivée du photon sur la sphère. En revanche, les termes

$$Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0 \quad \text{et} \quad \frac{Q(1 - \eta_i) + \eta_i - \eta_0}{Q} \quad (182)$$

peuvent être immédiatement évalués à partir des valeurs de η_0 et η_i calculées lors de l'échantillonnage de la direction.

Le terme $f(\mu)$ est, en revanche, plus délicat à connaître. Il s'agit de la valeur en μ de la densité de probabilité f de la variable analogue donnant la direction de diffusion. On rappelle qu'ici, μ est le cosinus de l'angle θ' entre la direction du photon incident et la direction du photon diffusé (voir la figure 45 ci-dessous). Or, seul l'angle θ (par rapport à l'axe passant par le centre de la sphère) a été calculé.

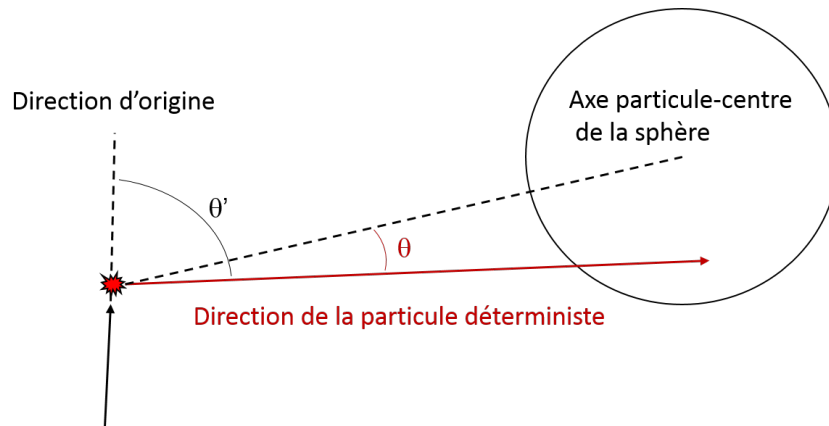


FIGURE 45 – Représentation des angles de diffusion en jeu dans le calcul du poids de la particule déterministe. L'angle θ est échantillonné, puis l'angle θ' est calculé pour évaluer la valeur de $f(\mu)$.

La première étape est d'évaluer la valeur de μ correspondante, pour déterminer ensuite la valeur de $f(\mu)$. Il est ici obtenu par le produit scalaire entre la direction du photon d'origine et la direction du photon déterministe. La fonction f dépend ensuite de l'interaction réalisée, puisque la densité de probabilité échantillonnée est différente pour chaque interaction. On distingue ici trois cas : la diffusion Rayleigh, la diffusion Compton pour un photon d'énergie supérieure à 5 MeV, et la diffusion Compton pour un photon d'énergie inférieure à 5 MeV.

Cas de la diffusion Rayleigh

Dans le cas de la diffusion Rayleigh pour un photon d'énergie E , la section efficace différentielle en angle est donnée par :

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{Rayleigh}}}{d\mu d\phi'} = r_e^2 \frac{1 + \mu^2}{2} [F(q, Z)]^2 \quad (183)$$

Avec $F(q, Z)$ le facteur de forme atomique [Born, 1969], où Z est le numéro atomique de l'atome interagissant avec le photon, et où q vaut $(E/c)[2(1 - \mu)]^{1/2}$. La grandeur r_e est le rayon classique de l'électron. On notera que la dépendance en énergie est ici omise pour simplifier les notations.

Sachant que l'angle azimutal ϕ' est uniformément distribué sur $[0; 2\pi]$, on a :

$$\frac{d\sigma_{\text{Rayleigh}}}{d\mu} = \int_0^{2\pi} r_e^2 \frac{1 + \mu^2}{2} [F(q, Z)]^2 d\phi \quad (184)$$

$$= \pi r_e^2 (1 + \mu^2) [F(q, Z)]^2 \quad (185)$$

Afin d'être exprimée comme une densité de probabilité, cette fonction doit être normalisée. Elle est donc divisée par son intégrale, qui est alors la section efficace totale de la diffusion Rayleigh :

$$\int \frac{d\sigma_{\text{Rayleigh}}}{d\mu} d\mu = \sigma_{\text{Rayleigh}} \quad (186)$$

Ce qui permet finalement d'obtenir la densité de probabilité analogue $f_{\text{Ray}}(\mu)$ utilisée dans le calcul du poids du photon déterministe :

$$f_{\text{Ray}}(\mu) = \frac{\pi r_e^2 (1 + \mu^2) [F(q, Z)]^2}{\sigma_{\text{Rayleigh}}} \quad (187)$$

Cas de la diffusion Compton ($E > 5 \text{ MeV}$)

Dans le cas d'une diffusion Compton pour laquelle l'énergie du photon incident est supérieure à quelques MeV, les effets d'élargissement Doppler et de liaison des électrons au noyau sont négligeables. L'électron touché peut alors être considéré comme étant au repos, et la section efficace différentielle en angle est donnée par la formule de Klein-Nishina [Klein and Nishina, 1929] :

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{Compton}}^{K-N}}{d\mu d\phi'} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E_C}{E}\right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1\right) \quad (188)$$

où

$$E_C = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \mu)} \quad (189)$$

avec m_e la masse de l'électron. Toutefois, pour un photon interagissant avec un atome de numéro atomique Z , la diffusion Compton peut avoir lieu avec n'importe lequel des Z électrons du cortège. La section efficace différentielle est alors :

$$\frac{d^2 \sigma_{Compton}^{K-N}}{d\mu d\phi'} = Z \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1 \right) \quad (190)$$

De même que précédemment, l'angle azimutal ϕ' est distribué uniformément sur $[0; 2\pi]$ et on obtient ainsi :

$$\frac{d\sigma_{Compton}^{K-N}}{d\mu} = Z \pi r_e^2 \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1 \right) \quad (191)$$

Finalement, après normalisation, on obtient la densité de probabilité analogue :

$$f_{Comp}^{E>5MeV}(\mu) = Z \frac{\pi r_e^2}{\sigma_{Compton}^{K-N}} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1 \right) \quad (192)$$

Cas de la diffusion Compton ($E < 5 \text{ MeV}$)

Dans le cas où l'énergie du photon est inférieure à 5 MeV, il est nécessaire de prendre en compte les effets d'élargissement Doppler et d'énergie de liaison des électrons. Pour cela, la fonction de diffusion élastique $S(E, \mu)$ est introduite [Ribberfors and Berggren, 1982] et on obtient la section efficace différentielle :

$$\frac{d^2 \sigma_{Compton}}{d\mu d\phi'} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1 \right) S(E, \mu) \quad (193)$$

On notera la disparition du facteur Z par rapport à la section efficace à haute énergie, le nombre d'électrons liés à l'atome étant pris en compte dans le calcul de la fonction $S(E, \mu)$. Après intégration sur ϕ' et normalisation, on obtient la densité de probabilité :

$$f_{Comp}^{E<5MeV}(\mu) = \frac{\pi r_e^2}{\sigma_{Compton}} \left(\frac{E_C}{E} \right)^2 \left(\frac{E_C}{E} + \frac{E}{E_C} + \mu^2 - 1 \right) S(E, \mu) \quad (194)$$

5.6 Conclusion

Le code de simulation Monte-Carlo Phoebe est adapté à l'ajout du transport pseudo-déterministe pour le calcul de la dose hors-champ, particulièrement grâce à sa modularité et aux modèles physiques implémentés. Le fichier d'entrée permet de paramétrer la simulation, qui est accomplie par une série de fonctions qui simulent le transport d'une particule quelconque. Ces fonctions peuvent être modifiées pour transformer l'algorithme suivi par certaines particules. Dans cette implémentation, la boucle principale transporte de manière différente les particules de statut «Déterministe» et celles de statut «Complémentaire» de manière à produire l'algorithme du transport pseudo-déterministe. Une fonction additionnelle a la charge de l'attribution du statut «complémentaire» et de la création de la particule déterministe. Cette fonction débute par l'échantillonnage de la direction du photon déterministe, puis, selon le type de diffusion et l'énergie du photon incident, elle se poursuit avec le calcul ou l'échantillonnage de son énergie. La dernière étape est l'attribution du premier facteur correctif du poids, qui peut être calculé à partir de la direction obtenue. Quel que soit le type de diffusion, la valeur de la densité de probabilité correspondant à l'angle

de diffusion déterministe peut être calculée à partir de l'énergie et de la direction du photon d'origine. La particule déterministe peut ensuite être placée dans la pile et être transportée en ligne droite jusqu'à la surface de la sphère.

Ce chapitre résume la quasi-totalité de l'implémentation dans Phoebé, dont l'utilisation est décrite en annexe B. Toutefois, à la manière de MCNP, des techniques supplémentaires ont également été ajoutées en soutien au transport pseudo-déterministe. Le chapitre suivant se concentre sur ces techniques appelées ici «auxiliaires», utilisées notamment pour combler les défauts du transport pseudo-déterministe.

6 Techniques auxiliaires

6.1 Introduction

La méthode du transport pseudo-déterministe, que ce soit de manière intrinsèque ou par les choix d'implémentation, n'est pas une solution parfaite au problème du calcul de la dose hors-champ. Notamment, dans certains cas d'application, on constate que l'amélioration de la variance peut être faible voire inexistante (par exemple, dans le cas décrit par la suite en 7.2.3).

Plusieurs inconvénients potentiels ont été identifiés et sont listés et illustrés sans ordre d'importance dans la section suivante. Pour chacun d'entre eux, lorsque c'est possible, une solution est proposée. Pour certains, il s'agit de l'ajout d'une technique de réduction de variance complémentaire, utilisée au cours du processus de transport pseudo-déterministe, et destinée à remédier autant que possible au problème rencontré. Différentes techniques ont donc été ajoutées à la méthode du transport pseudo-déterministe «basique», chacune représentant une proposition de solution compte tenu de son implémentation actuelle dans Phoebe. Le principe et l'implémentation de chaque technique sont ensuite décrits, puis, pour certaines d'entre elles, un premier aperçu de leur effet sur le problème rencontré est donné. Leur effet sur l'efficacité des simulations sera précisé davantage dans le chapitre suivant.

6.2 Principales faiblesses de la méthode

6.2.1 Sauts de variance

En simulation analogue, un « saut de variance » survient principalement lorsqu'une estimation de la dose est réalisée dans une région où le dépôt d'énergie est peu probable (c'est le cas, notamment, en zone hors-champ), ou en début de simulation lorsque peu d'histoires ont été comptabilisées dans l'estimation. Lorsque très peu de particules ont atteint la région d'intérêt, l'estimation semble converger à mesure que de nouvelles histoires sont simulées sans apporter de contributions supplémentaires à la dose moyenne. Lorsqu'une histoire aboutit finalement à un dépôt d'énergie dans la région d'intérêt, la moyenne peut augmenter instantanément de manière significative. Cette augmentation a pour effet d'accroître soudainement l'incertitude sur l'estimation : c'est ce qu'on appelle un saut de variance. Ces sauts disparaissent généralement lorsque suffisamment d'histoires ont été simulées, et qu'un nouveau dépôt d'énergie ne modifie que peu la moyenne.

Dans le cas du transport pseudo-déterministe, la sphère est placée dans une région de l'espace que très peu de particules atteignent. Il y a donc peu d'interactions à proximité, et la plupart des dépôts de dose proviennent de particules déterministes créées loin de la sphère, de poids très faibles. Cependant, lorsqu'une interaction a lieu à faible distance de la sphère, la particule déterministe créée peut porter un poids excessivement grand par rapport aux autres particules déterministes qui l'ont atteinte auparavant. Cette différence de poids peut être suffisante pour créer un saut de variance.

Pour illustrer ce problème, prenons une configuration de simulation où des diffusions sont possibles mais sont assez peu probables à proximité de la sphère. La configuration utilisée est illustrée ci-dessous sur la figure 46.

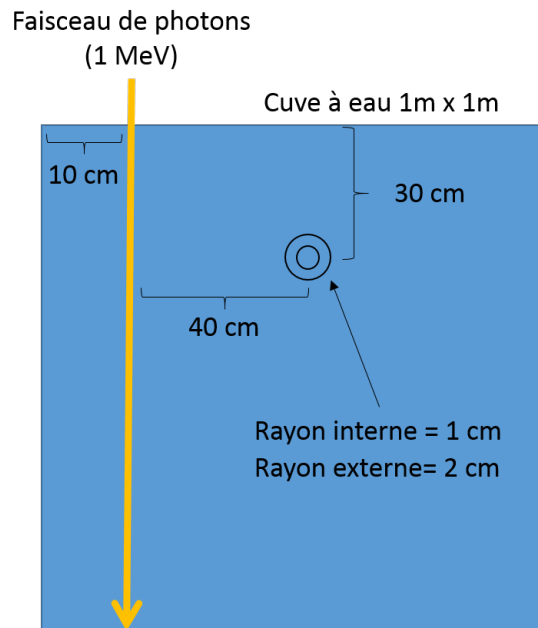


FIGURE 46 – Configuration de simulation (cuve à eau) pour l’observation de sauts de variance. La dose est estimée dans une sphère confondue avec la sphère interne du transport pseudo-déterministe.

La cuve d’eau simulée est un cube d’un mètre de côté, traversée par un faisceau de photons monoénergétique de 1 MeV, unidirectionnel, et dirigé de haut en bas selon l’axe en pointillés sur la figure 46. Cet axe est situé à 10 cm du bord gauche de la cuve et à 50 cm de la face avant. La dose est estimée dans une sphère de 1 cm de rayon, placée à 30 cm de la surface, 40 cm de l’axe du faisceau, et 50 cm de la face avant. Elle est confondue avec la sphère interne d’une sphère pseudo-déterministe de rayon 2 cm ($Q = 5$). La figure 47 représente l’évolution de l’erreur sur l’estimation de la dose dans cette configuration, au cours d’une simulation de 30 minutes.

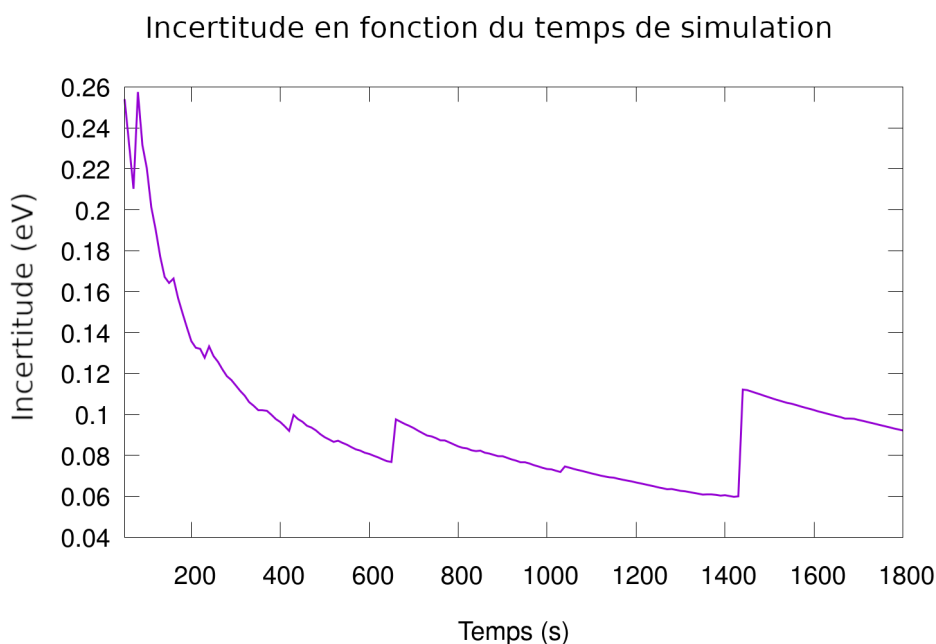


FIGURE 47 – Incertitude en fonction du temps de simulation dans un exemple d’illustration des sauts de variance au cours d’une simulation courte.

On peut observer plusieurs sauts de variance dans cet exemple. Le dernier d’entre eux, autour de 1400 secondes, fait notamment remonter l’incertitude au niveau qu’elle avait atteint après environ 300 secondes.

L’intensité des sauts de variance est, de plus, corrélée à leur fréquence d’apparition. La probabilité d’un saut de variance et la moyenne des poids entrants sont toutes les deux d’autant plus faibles qu’il est difficile pour les particules d’atteindre la sphère. Par conséquent, moins le saut de variance est probable et plus il sera important s’il a lieu, puisque le poids de la majorité des particules déterministes est très faible.

Les sauts de variance sont des phénomènes difficiles à traiter. Notamment, puisque leur poids est généralement élevé, les particules qui les causent peuvent contribuer très largement à la dose déposée dans la sphère. Il n’est alors pas possible de simplement les éliminer (en filtrant les poids trop élevés, par exemple) sans introduire un biais important dans l’estimation.

Lorsque le milieu d’intérêt est à l’intérieur de la sphère interne, alors la sphère externe protège en partie des sauts de variance. Une interaction pseudo-déterministe ne peut en effet pas avoir lieu à l’intérieur de la première sphère, et elle ne peut donc pas être trop proche du milieu où l’estimation est réalisée. L’équipe du Los Alamos National Laboratory recommande cependant, lors de l’utilisation de la méthode DXTRAN de MCNP, d’éviter de placer la sphère dans un milieu diffusant [X-5 Monte Carlo Team, 2003].

6.2.2 Particules de poids trop faibles

Le principal défaut de la méthode du transport pseudo-déterministe est la grande disparité dans les poids des particules déterministes qui atteignent la sphère. En particulier, la diminution exponentielle du poids avec la distance jusqu’à la sphère peut aboutir à des

valeurs qui diffèrent de plusieurs ordres de grandeur entre des particules créées à proximité de la sphère et des particules créées dans des régions plus éloignées.

À titre d'exemple, une simulation est réalisée dans la configuration illustrée ci-dessous sur la figure 48. Cette géométrie fictive a été utilisée principalement pour tester le code en présence d'hétérogénéités afin d'éviter de se limiter à des cuves homogènes.

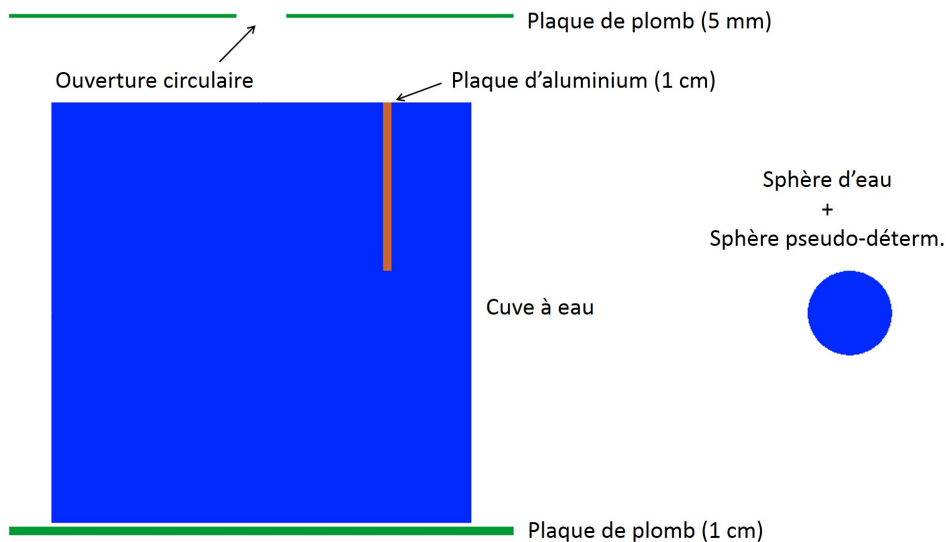


FIGURE 48 – Visualisation de la configuration de simulation pour l'étude des poids entrant dans la sphère.

Une cuve d'eau cubique de 50 cm de côté est placée dans le vide. Une source cône (demi-angle d'ouverture 30 degrés) et monoénergétique de photons de 1 MeV, dirigée vers le bas, est placée à 15 cm au-dessus de la surface, en son centre. La collimation est réalisée par une ouverture circulaire de 6 cm de diamètre percée dans une plaque de plomb d'épaisseur 5 mm (côtés 60 cm), placée à 10 cm au-dessus de la surface. Une seconde plaque de plomb d'épaisseur 1 cm (côtés 60 cm) est placée 1 mm sous la cuve. Finalement, une plaque d'aluminium de dimensions 50×20×1 cm est positionnée sous la surface de la cuve, à 9.5 cm du bord droit. La dose est estimée dans une sphère d'eau de 5 cm de rayon placée dans le vide, centrée par rapport à la face droite de la cuve et à une distance de 45 cm de celle-ci. Une sphère pseudo-déterministe est confondue avec la sphère d'estimation (sans sphère interne ici, c'est à dire avec $Q = 1$).

La distribution des poids des particules déterministes entrant dans la sphère est donnée ci-dessous en figure 49, pour environ 10^6 particules primaires.

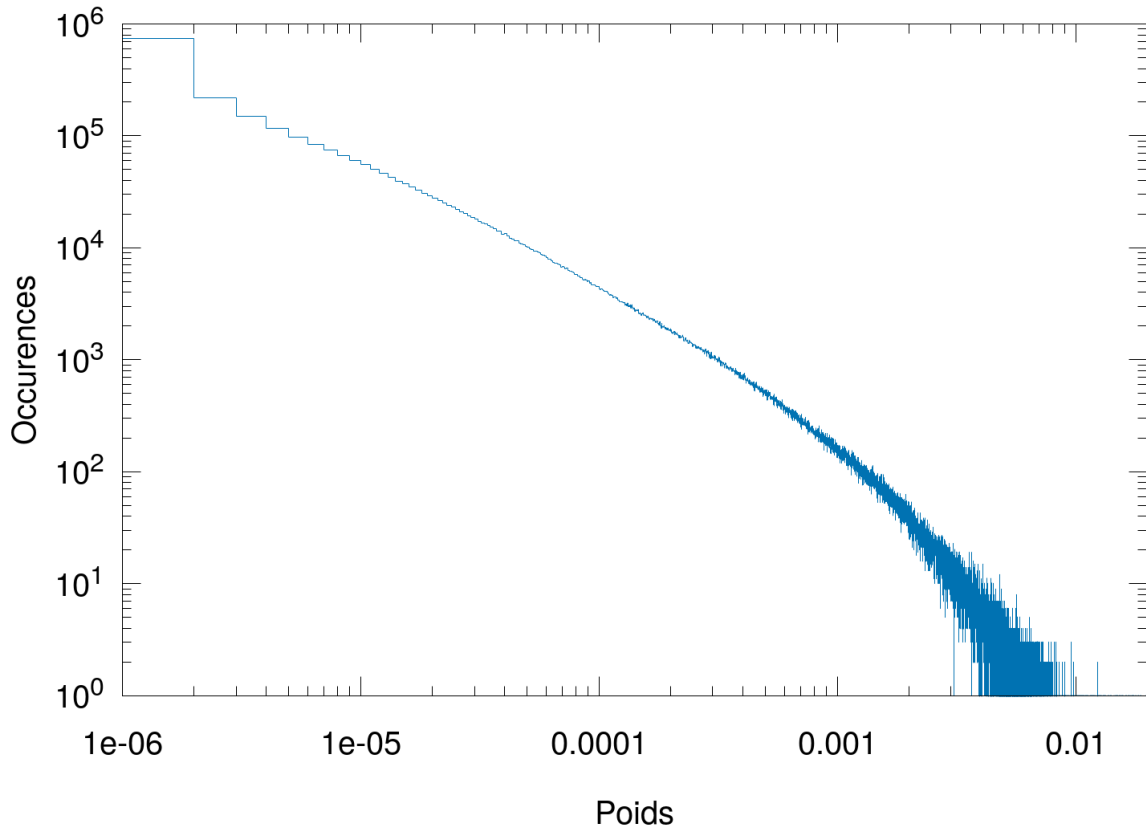


FIGURE 49 – Distribution entre 10^{-6} et 0,02 des poids des particules entrant dans la sphère pseudo-déterministe dans la configuration de test de la figure 48 (taille de bin constante de 10^{-6}).

Dans cette distribution, 80% des particules portent un poids en dessous de la moyenne, située à environ 1.4×10^{-4} . Notamment, dans cette configuration, environ 75% du poids entrant dans la sphère est porté par seulement 10% des particules. Cela signifie que la majorité d'entre elles ne contribuent que très peu à l'estimation de la dose car leur poids est très faible devant celui des particules de poids les plus élevés. Puisqu'un temps de calcul important est tout de même investi dans leur suivi, la convergence de l'estimation est ralentie. La méthode de la roulette russe peut apporter une solution partielle à ce problème : en échange d'une augmentation de la variance, il est possible d'éliminer une partie des particules de poids faibles et ainsi de gagner suffisamment en temps de calcul pour améliorer l'efficacité. Son utilisation dans cette implémentation du transport pseudo-déterministe est détaillée à partir de la section 6.3.1.

6.2.3 Faible probabilité de diffusion

La méthode du transport pseudo-déterministe ne peut s'appliquer que lors d'une diffusion. À faible énergie, et en particulier dans les matériaux de numéro atomique élevé, l'effet photoélectrique reste dominant. La méthode risque alors de n'être utilisée que très peu au cours de la vie d'une particule et il peut être difficile d'obtenir beaucoup de contributions sur la sphère. La figure 50 ci-après représente le nombre de diffusions (Compton ou Rayleigh)

observées par particule source émise, pour différentes énergies d'une source de photons monoénergétique, dans la configuration décrite sur la figure 48. On notera que le nombre de diffusions comprend également celles subies par les particules secondaires éventuellement créées.

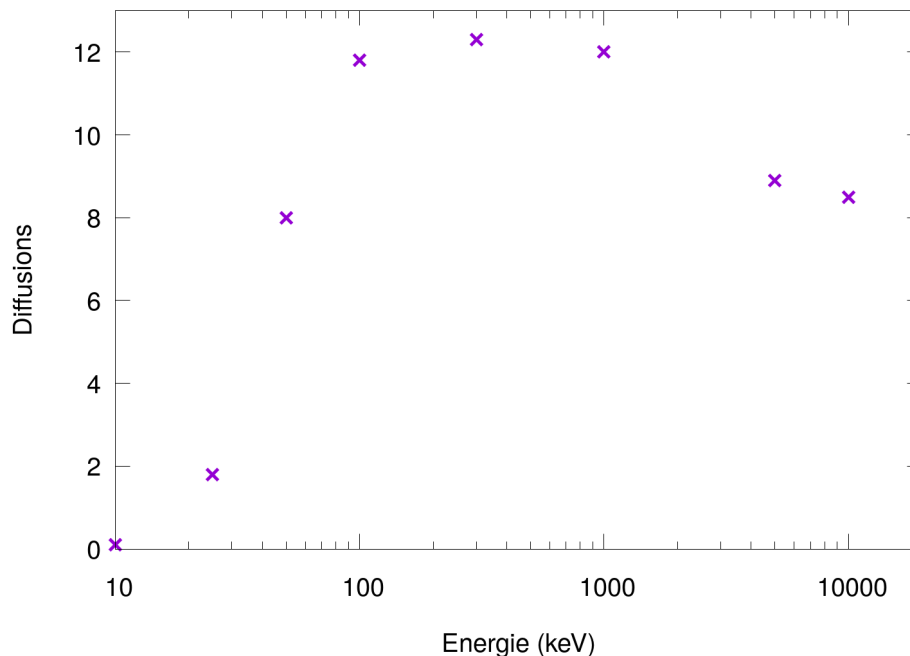


FIGURE 50 – Évolution du nombre de diffusions par histoire en fonction de l'énergie de la source entre 10 keV et 20 MeV, dans la configuration de test de la figure 48.

Le nombre de diffusions par histoire décroît rapidement en dessous de 100 keV. Cette diminution peut s'expliquer par l'augmentation de la probabilité d'effet photoélectrique à mesure que l'énergie décroît, qui devient dominante devant celle de la diffusion Compton à partir de 30 keV dans l'eau. Au delà de 1 MeV, la diminution observée pourrait s'expliquer par l'augmentation du libre parcours moyen des photons, qui quitteraient la géométrie de calcul en subissant moins d'interactions et donc moins de diffusions. Le libre parcours dans l'eau à 10 MeV est en effet proche de 45 cm, contre 15 cm à 1 MeV et 6 cm à 100 keV. Cette diminution pourrait être en partie compensée à haute énergie par l'apparition de créations de paires, qui entraîne la création de nouveaux photons et donc de diffusions supplémentaires via l'annihilation électron-positon.

Une solution à ce problème pourrait reposer sur une combinaison du transport pseudo-déterministe avec la méthode des « interactions renforcées », qui vise à augmenter la probabilité d'un type d'interaction par rapport aux autres. Cependant, l'implémentation de cette dernière passe par une spécialisation de la classe dédiée aux processus de transport des photons, qui échantillonne notamment le type d'interaction à effectuer. Une spécialisation de cette classe étant déjà nécessaire au fonctionnement du transport pseudo-déterministe, ces deux méthodes sont, dans l'implémentation actuelle, exclusives l'une de l'autre.

6.2.4 Particules entrant dans la sphère sans diffusion

La seule manière d'entrer dans la sphère, pour un photon qui n'est pas déjà dirigé vers elle lors de son émission, est de subir une diffusion au cours de son histoire. Or, à la suite d'une diffusion, une particule déterministe est amenée à la sphère et il est impossible pour la particule complémentaire d'y entrer et d'y interagir. Les seules particules entrant dans la sphère sont donc les particules déterministes, de poids généralement très faibles. Hormis le cas où une source de photons émet directement vers la sphère, et où des particules de poids très élevés peuvent y interagir sans subir de diffusion, plusieurs interactions peuvent occasionner l'émission de photons directement vers la sphère. Ils peuvent alors y interagir avec le même poids qu'à leur émission (généralement 1), et augmenter fortement la variance. C'est notamment le cas des rayonnements X de fluorescence, du rayonnement de freinage des électrons, et des photons émis par annihilation d'un positon avec un électron. Un dernier cas très spécifique est dû à une particularité du traitement de l'interaction photoélectrique dans Phoebe, dont la section efficace est volontairement surestimée pour des raisons de rapidité d'échantillonnage. Pour compenser cette surestimation, il existe une possibilité pour que le photon continue en réalité son chemin sans être affecté par l'interaction photoélectrique qu'il vient de subir (autrement dit, l'interaction n'a pas lieu). S'il s'agit d'une particule complémentaire dirigée vers la sphère, elle est alors libre d'y entrer au prochain pas puisqu'elle vient de subir une interaction.

Enfin, outre les photons dirigés vers la sphère, il reste la possibilité que des électrons ou des positons, créés hors de la sphère et non contraints par le transport pseudo-déterministe y entrent et y déposent leur énergie.

Toutes ces sources de dépôt d'énergie ne provenant pas du transport pseudo-déterministe limitent son efficacité. Des solutions, qui seront détaillées dans la partie 6.5 ont été mises en place afin de limiter au mieux l'effet des photons analogues entrant dans la sphère. En particulier, les particules émises directement vers la sphère peuvent tout de même y être amenées de manière pseudo-déterministe. Il n'y a alors pas de nouvel échantillonnage de la direction mais uniquement un transport forcé jusqu'à la sphère. Ces particules possèdent toutefois des poids globalement plus élevés que les particules déterministes. Dans le cas de l'émission par fluorescence, un transport pseudo-déterministe complet (direction et distance parcourue) est réalisé.

6.2.5 Particules traversant la sphère sans interagir

La méthode du transport pseudo-déterministe permet d'amener des particules à la surface d'une zone d'intérêt. Cependant, rien ne les force à déposer une énergie dans cette dernière. En particulier pour les milieux de faible densité ou pour des photons de haute énergie, une particule déterministe arrivant à la surface de la sphère peut la traverser sans interagir, diminuant l'effet de la méthode. Un moyen efficace pour remédier à ce problème serait l'application de la méthode du «passage splitting», forçant une interaction dans un module donné lorsqu'un photon y entre. Elle est cependant difficile à mettre en place avec l'implémentation actuelle du transport pseudo-déterministe, la sphère pouvant contenir plusieurs modules différents. Un splitting est tout de même réalisé à l'entrée de la sphère, afin d'augmenter la probabilité qu'au moins une des particules interagisse. Les nombreuses particules créées subissent une roulette en sortie de la sphère pour éviter d'investir davantage de temps à les suivre.

Les sections suivantes donnent le détail des techniques implémentées dans Phoebé pour remédier à certaines difficultés mentionnées précédemment. Elles sont divisées en trois catégories : les techniques modifiant le nombre de photons déterministes suivis, celles modifiant le nombre de particules créées, et celles s'appliquant aux autres interactions du photon.

6.3 Techniques impactant le nombre de particules suivies

6.3.1 Roulette russe à l'entrée de la sphère

Dans l'implémentation du transport pseudo-déterministe au sein du code Phoebé, la roulette russe est utilisée lorsqu'une particule déterministe atteint la sphère, c'est-à-dire lorsque son poids final est connu. L'objectif est d'éliminer les particules dont le poids est trop faible pour que leur suivi soit véritablement utile, afin de libérer du temps de calcul.

Préalablement, il est indispensable de définir le poids à partir duquel on considère qu'une particule ne vaut plus la peine d'être suivie. Puisque la méthode doit pouvoir être utilisée dans n'importe quelle configuration, il n'est pas possible d'utiliser une valeur constante qui resterait la même d'un cas à l'autre. Le poids moyen des particules déterministes peut, en effet, varier de plusieurs ordres de grandeur selon la configuration étudiée.

Au contraire, cette valeur de poids seuil, qu'on appelle ici w_s , doit donc être basée sur une estimation liée à la configuration étudiée. Il serait éventuellement possible de s'appuyer sur le poids moyen des particules qui atteignent la sphère. Ainsi, le poids des nouvelles particules entrantes pourrait être comparé à celui des autres particules entrées au cours de la simulation. S'il est trop faible par rapport à la moyenne, elles subiraient une roulette. Cependant, suivant la forme de la distribution des poids, il reste possible que certaines particules de poids égal ou même supérieur à la moyenne ne contribuent toujours pas suffisamment (la contribution principale pouvant être portée par une très faible quantité de particules de poids très élevé). Le poids médian souffre du même problème que la moyenne.

Une seconde possibilité consiste à s'appuyer non pas sur le poids moyen d'une particule, mais sur le poids moyen apporté à la sphère au cours d'une histoire par l'ensemble des particules déterministes qui ont atteint la sphère. Ainsi, on s'assure que les particules considérées comme importantes ont un poids suffisant pour modifier de manière significative l'énergie déposée au cours de leur histoire. C'est cette solution qui a été choisie pour cette implémentation. Le seuil adopté pour utiliser la roulette russe à l'entrée de la sphère est égal à 10% du poids moyen entrant dans la sphère par histoire ; toutes les particules dont le poids est inférieur à cette valeur sont potentiellement éliminées par la roulette. Cette valeur est estimée à partir de la somme des poids entrants, qui est comptabilisée au cours de la simulation, puis divisée par le nombre d'histoires simulées jusqu'alors pour obtenir w_s lors de l'entrée d'un photon déterministe dans la sphère.

Dans la configuration de test présentée précédemment en figure 48, 50% des particules entrantes ont un poids inférieur à w_s . Elles sont responsables de l'apport de seulement 1% du poids entrant dans la sphère. On constate que ces valeurs varient peu avec le choix du seuil. Par exemple, pour un seuil deux fois plus élevé, 60% des particules se situent sous w_s et contribuent pour seulement 2.5% du poids. Une valeur précise a donc peu d'importance ; l'essentiel est que le seuil soit proportionnel au poids moyen entrant par histoire, afin de s'adapter à la configuration étudiée.

Il reste ensuite à définir quelle probabilité de survie donner aux particules qui subissent une roulette. Si on appelle P_k la probabilité de tuer une particule de poids w lors d'une roulette, alors le poids en cas de survie w' est donné par :

$$w' = \frac{w}{1 - P_k} \quad (195)$$

On souhaiterait que la probabilité de tuer une particule soit d'autant plus élevée que son poids est faible. En reformulant l'équation précédente, il est possible d'exprimer la probabilité P_k telle que :

$$P_k = 1 - \frac{w}{w'} \quad (196)$$

En choisissant de donner une valeur constante au poids en cas de survie w' (on l'appellera par la suite poids cible w_C), on constate que plus le poids w est faible, et plus la probabilité de tuer la particule est proche de 1.

Le poids w_C devant être supérieur au seuil d'application de la roulette, on choisit $w_C = 5w_S$, soit 50% du poids moyen entrant dans la sphère par histoire. Le poids d'une particule survivant à la roulette se retrouve ainsi au dessus du seuil, et sa contribution est toujours significative.

La figure 51 ci-dessous représente la distribution des poids entrants dans la sphère dans la configuration test présentée en figure 48, après application de la roulette, pour environ 10^6 histoires simulées.

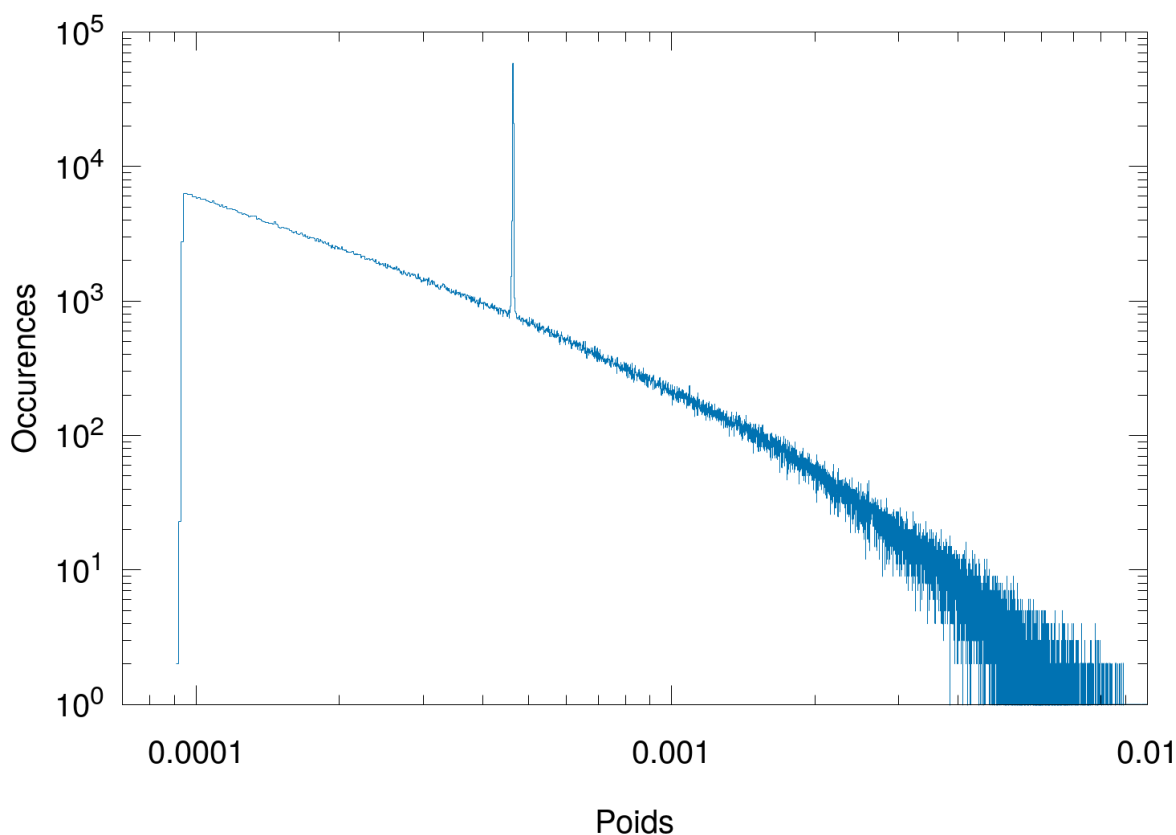


FIGURE 51 – Distribution des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test de la figure 48, après application de la roulette à l'entrée de la sphère (taille de bins 10^{-6}).

On constate que toute la partie inférieure à w_S (environ 9×10^{-5}) a été supprimée. Les particules survivant à la roulette voient leur poids augmenté jusqu'à $w_C = 5w_S$, ce qui correspond au pic observé à 4.5×10^{-4} . La largeur du pic est due à la fluctuation, au cours de la simulation, du poids moyen entrant dans la sphère et donc de w_C .

6.3.2 Splitting à l'entrée de la sphère

En plus de la roulette, le splitting est utilisé à l'entrée de la sphère lorsque le poids d'une particule est supérieur à $9w_S$. L'objectif est d'augmenter la probabilité d'obtenir un dépôt de dose dans la sphère pour les particules de poids élevé pour réduire la variance en ciblant seulement les particules les plus importantes, et pour limiter la perte de temps qui serait constatée pour un splitting de toutes les particules entrantes sans distinction de poids. La particule entrante de poids w est divisée en N copies, chacune portant un poids proche de w_C , défini tel que $N = \frac{w}{w_C}$. Ce nombre étant arrondi à l'entier le plus proche, le poids des particules peut donc éventuellement être légèrement différent de w_C . Il sera cependant toujours compris entre w_S et $9w_S$. Afin d'éviter un splitting excessif en début de simulation, dans le cas où le poids déposé au cours des premières histoires serait anormalement faible, celui-ci ne débute qu'à partir de la 1000^{ème} histoire. Il en est de même pour la roulette appliquée à l'entrée de la sphère.

La figure 52 ci-dessous représente la distribution des poids dans la même configuration que précédemment, mais après application du splitting en plus de la roulette, pour environ 10^6 histoires simulées.

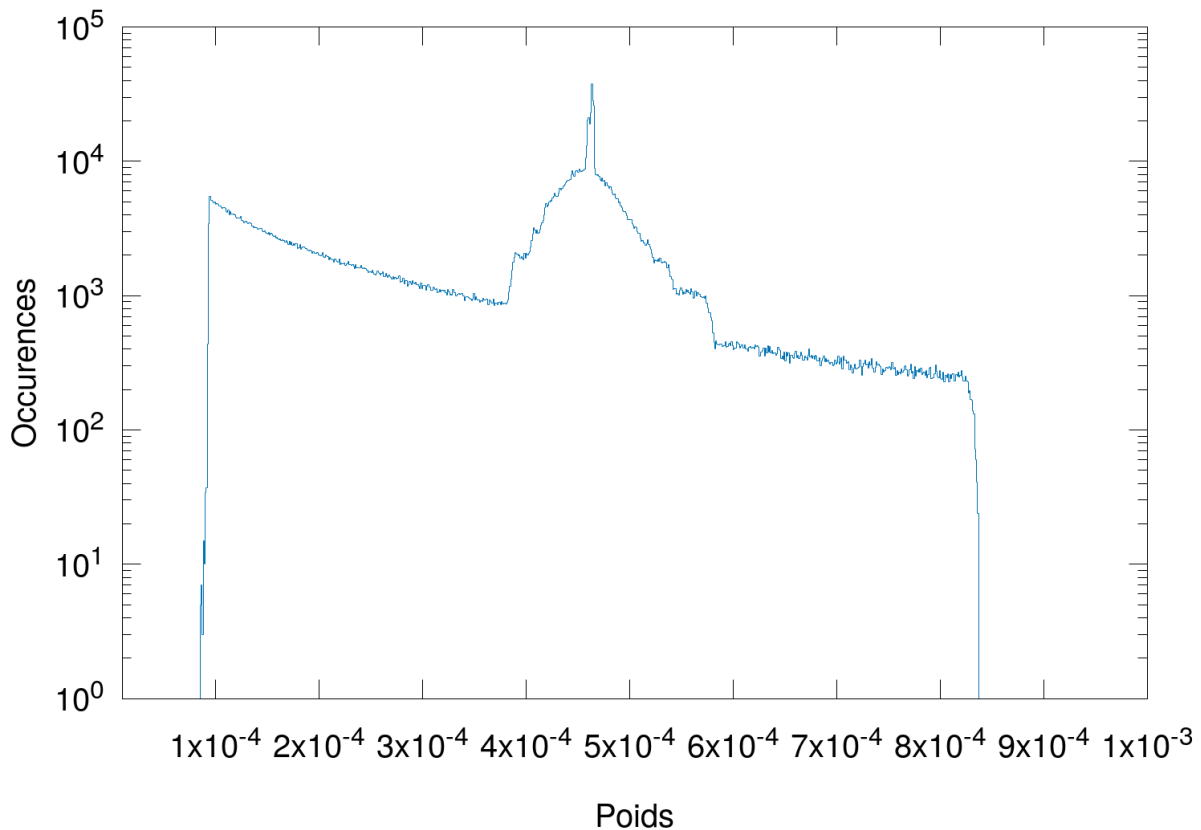


FIGURE 52 – Distribution des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test de la figure 48, après application de la roulette et du splitting (taille de bins 10^{-6}).

Cette fois-ci, les poids supérieurs à $9w_s$ sont supprimés de la distribution, qui se retrouve centrée sur le pic à $5w_s$. Les poids des particules divisées se retrouvent à proximité de w_c , formant des paliers dans la distribution dus à la nature discrète du splitting. Dans la configuration de test utilisée ici (figure 48), les 10 % des particules de poids les plus élevés contribuaient à 75 % du poids entrant, tandis que les 10 % des particules aux poids les plus faibles contribuaient à 0.0003 % du total. Après application de la roulette et du splitting, les 10 % des particules de poids les plus élevés contribuent pour 17 % du total et les 10 % aux poids les plus faibles contribuent à 3 % du total. On constate donc un changement important dans la distribution des poids entrants, qui semble indiquer un effet positif pour l'efficacité de l'estimation. Cet effet est évalué par la suite en 7.2.4.

6.3.3 Roulette russe à la sortie de la sphère

Une roulette russe est appliquée aux particules sortant de la sphère, qui sont peu intéressantes puisque leur poids a déjà été largement réduit lors de leur transport déterministe. Elles doivent également être diffusées vers l'arrière pour revenir dans la région d'intérêt et leur poids serait alors fortement réduit une seconde fois par le transport pseudo-déterministe. Cette roulette a également pour but de compenser la perte de temps introduite par le splitting à l'entrée de la sphère, qui peut créer de nombreuses particules que l'on ne souhaite pas suivre à l'extérieur. Le poids cible est ici défini tel que $w_{c'} = 1$, et cette

roulette élimine ainsi une large majorité des particules sortantes. Elle est appliquée dès la première histoire simulée.

6.3.4 Roulette russe à la création de la particule et aux interfaces

Lorsqu'une particule déterministe est créée, son poids est modifié une première fois après échantillonnage de l'angle de diffusion. Puisqu'on sait qu'il peut uniquement décroître lors du transport jusqu'à la sphère, alors, s'il est déjà inférieur à w_S , il le sera nécessairement aussi à son arrivée. Afin d'éviter le processus de transport pour de telles particules, on applique donc la roulette russe après leur création, avec pour poids cible w_C .

La dernière technique appliquée après la création de la particule déterministe est une roulette russe s'opérant aux interfaces entre deux modules, lors du transport entre le point d'interaction initial et la surface de la sphère. Son objectif est le même que celui de la roulette appliquée après la création de la particule : éliminer les particules de poids faible plus tôt dans leur suivi s'il s'avère que leur poids sera trop faible à leur arrivée.

Une fois le premier facteur multiplicatif appliqué au poids suite à l'échantillonnage de l'angle de diffusion vers la sphère, le poids doit ensuite être multiplié par la probabilité de non-interaction :

$$\exp\left(-\sum_{i=1}^I \mu_i d_i\right) \quad (197)$$

Où μ_i est le coefficient d'atténuation du milieu i , d_i est la distance parcourue dans ce milieu, et I est le nombre de milieux traversés. Afin de calculer cette valeur, la particule est suivie pas à pas jusqu'à la sphère, mais sans interagir. De la même manière qu'une particule analogue, elle s'arrête donc à chaque interface. La somme des $\mu_i d_i$ est alors incrémentée en fonction du dernier milieu traversé (se référer éventuellement à la section 5.4.2). Le poids de la particule n'est mis à jour qu'une fois arrivée à la sphère, où l'exponentielle, coûteuse en temps, est finalement calculée. À une interface, il n'est donc pas possible de comparer directement le poids de la particule au seuil d'application de la roulette w_S . À la place, on définit une «atténuation maximale» autorisée pour la particule avant qu'elle subisse une roulette, qu'on notera α_{max} , telle que :

$$w_0 e^{-\alpha_{max}} = w_S \quad (198)$$

Avec w_0 le poids de la particule après échantillonnage de l'angle de diffusion (c'est-à-dire au début de son transport vers la sphère). Cette valeur est calculée à la création de la particule. Ensuite, à chaque interface, la somme des $\mu_i d_i$ est comparée à α_{max} . Lorsqu'elle dépasse cette valeur, on sait alors que le poids d'arrivée de la particule sera nécessairement inférieur à w_S . Dans ce cas, la roulette est appliquée en prenant pour poids cible :

$$w_{C''} = w_C \exp\left(\sum_{i=1}^J \mu_i d_i\right) \quad (199)$$

où J est le nombre de milieux traversés jusqu'ici. Cette exponentielle positive sera exactement compensée, à l'arrivée sur sphère, par la multiplication du poids prenant en compte l'atténuation dans les milieux 1 à J . La probabilité P_k de tuer la particule est alors :

$$P_k = 1 - \frac{w_0}{w_C^n} = 1 - \frac{w_0 \exp(-\sum_{i=1}^J \mu_i d_i)}{w_C} \quad (200)$$

Cette manière d'effectuer la roulette aux interfaces est équivalente à comparer directement le poids cible w_C au poids de la particule s'il avait été mis à jour au cours de son transport, qui vaudrait alors :

$$w_0 \exp(-\sum_{i=1}^J \mu_i d_i) \quad (201)$$

L'exponentielle d'atténuation n'est cependant calculée que si elle doit subir une roulette, évitant ainsi son calcul dans les autres cas. Les roulettes appliquées à la création de la particule et aux interfaces ne sont actives qu'après un certain nombre d'histoires donné par l'utilisateur, afin de ne pas entraver l'estimation de la carte d'importance décrite par la suite en 6.4.

On notera finalement que le splitting n'est pas utilisé aux interfaces. D'abord, le poids de la particule est susceptible de diminuer davantage : à une interface, on ne sait pas encore si le splitting sera nécessaire. De plus, les parcours des particules créées seraient tous identiques jusqu'à leur arrivée à la sphère, puisqu'elles sont transportées en ligne droite sans interaction. Leur transport coûtant du temps de calcul, il est alors préférable d'utiliser, si besoin, le splitting seulement à l'entrée de la sphère.

Ces techniques auxiliaires au transport pseudo-déterministe s'appliquent toutes après la création de la particule déterministe. Les particules éliminées par les roulettes doivent toutefois être créées et parfois transportées jusqu'à ce que leur poids soit trop faible. Il serait alors idéal que, dès le départ, ces particules ne soient pas créées. Les techniques décrites précédemment sont donc également accompagnées d'une roulette russe et d'un splitting réalisés *avant* la création de la particule déterministe. Ils sont destinés, respectivement, à limiter le nombre de particules de poids faibles créées et à augmenter le nombre d'interactions dans la sphère. Le détail de leur fonctionnement est décrit dans la partie suivante.

6.4 Procédés modifiant le nombre de particules créées

6.4.1 Génération d'une carte d'importance

La roulette effectuée à l'entrée de la sphère permet de réduire le temps passé à suivre des particules de poids trop faible. En revanche, même lorsqu'elles sont éliminées durant leur transport, ces particules doivent préalablement être créées, nécessitant un temps de calcul important pour les différents échantillonnages nécessaires (décrits en 5.5.2). Une manière d'éviter ces calculs, pour une partie d'entre elles, consiste à utiliser la roulette russe avant leur création. Dans cette implémentation du transport pseudo-déterministe, ceci est effectué à l'aide d'une grille en trois dimensions, qu'on appellera «carte d'importance», qui définit pour chaque position de l'espace la probabilité de créer ou non une particule pseudo-déterministe après une diffusion.

On constate par exemple, dans certains cas, que les poids des particules créées dans certaines régions de l'espace sont presque toujours en dessous du seuil de la roulette lorsqu'elles arrivent à la sphère. Pour illustrer le problème, reprenons la configuration utilisée dans la partie 6.2.2 (figure 48), en remplaçant uniquement la plaque d'aluminium par du plomb de 2 cm d'épaisseur. Cette configuration est illustrée ci-dessous sur la figure 53.

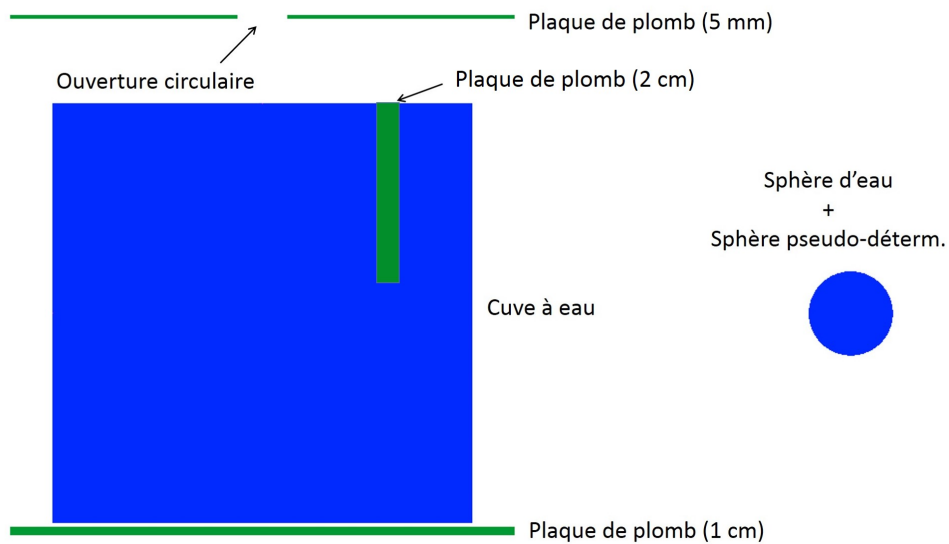


FIGURE 53 – Visualisation de la configuration de simulation pour l'étude des roulettes liées à la carte d'importance.

On superpose à cette géométrie une grille de voxels de dimensions $1000 \times 1000 \times 1000$, centrée sur la cuve. Un voxel représente alors un cube de 0,5 mm de côté. Lorsqu'une particule déterministe est créée, la valeur du voxel où l'interaction a eu lieu est incrémentée de 1. Après la simulation de 10^8 particules déterministes, on obtient une carte du nombre de particules créées en fonction de leur position, représentée ci-dessous en figure 54. La sphère pseudo-déterministe est placée à 45 cm de la face droite de la cuve et n'est pas visible ici. Ses caractéristiques n'auraient de toute façon, ici, pas d'importance.

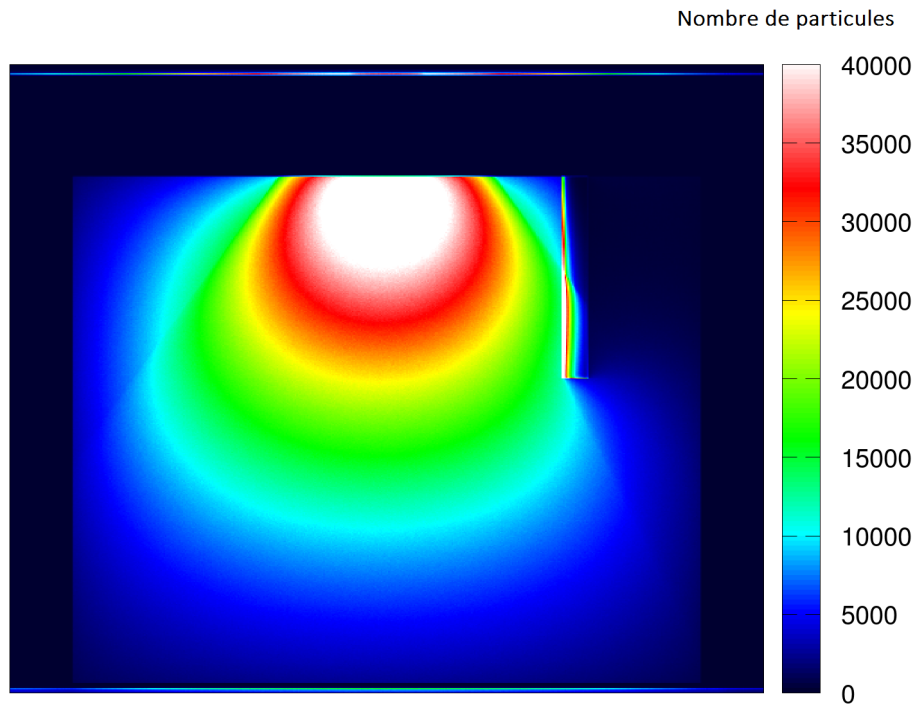


FIGURE 54 – Carte du nombre de particules déterministes créées en fonction de la position dans l’espace pour la configuration de test de la figure 53 (voxels sommés selon l’axe avant-arrière)

Ce résultat permet de mettre en évidence que la plupart des particules déterministes sont ici créées à l’entrée du faisceau dans la cuve, symétriquement selon son axe central. On observe également de nombreuses créations de particules sur le bord de la plaque de plomb, du côté du faisceau, où de nombreux photons interagissent. Cette carte est exactement équivalente à celle qu’on obtiendrait en comptabilisant le nombre de diffusions dans chaque voxel.

Imaginons maintenant une nouvelle grille de voxels identique à la dernière. Lorsqu’une particule déterministe atteint la sphère (avant de subir éventuellement une roulette ou un splitting), la valeur du voxel dans lequel elle a été créée est incrémentée de son poids. On obtient ainsi une cartographie du poids total amené à la sphère par les particules créées dans chaque région de l’espace. La carte obtenue après création de 10^8 particules déterministes est présentée ci-dessous en figure 55.

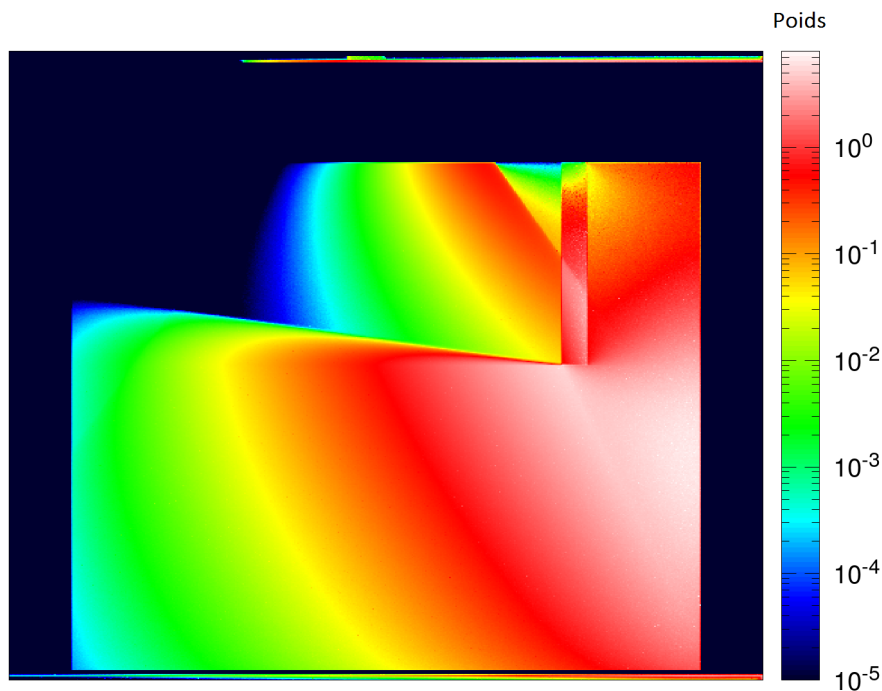


FIGURE 55 – Carte du poids total apporté à la sphère par les particules déterministes en fonction de la position de leur création pour la configuration de test de la figure 53 (voxels sommés selon l’axe avant-arrière, échelle logarithmique)

Cette carte est très différente de la précédente : on s’aperçoit ici que les particules créées à l’entrée de la cuve (en particulier dans la partie gauche du faisceau), ne contribuent que très peu au poids amené à la sphère, malgré leur très grand nombre. Au contraire, les particules créées dans la partie droite de la cuve, après la plaque de plomb, sont peu nombreuses mais contribuent à elles seules de manière bien plus importante. Étant en bord de cuve, elles n’ont qu’une faible épaisseur d’eau à traverser avant d’atteindre la sphère et leur poids n’est que peu réduit. À l’inverse, les particules créées à l’entrée de la cuve doivent traverser la plaque de plomb pour atteindre la sphère : leur poids est fortement diminué et leur contribution devient négligeable. On obtient ainsi des régions de l’espace où de très nombreuses particules sont créées, mais sans contribuer significativement à l’estimation.

Finalement, le rapport des deux cartes précédentes, en figure 56 ci-dessous, nous donne la cartographie du poids moyen amené à la sphère par particule déterministe créée. La valeur d’un voxel est une estimation de l’espérance du poids, à l’arrivée à la sphère, d’une particule déterministe créée à cette position. C’est cette carte qu’on appelle «carte d’importance», puisqu’elle donne l’importance des particules créées en chaque voxel vis-à-vis de l’estimation réalisée.

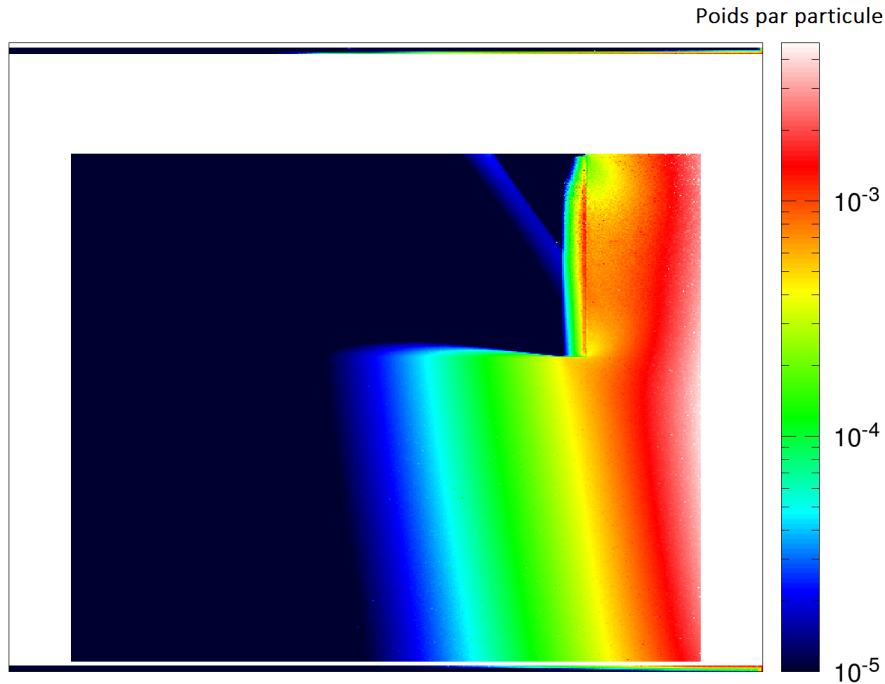


FIGURE 56 – Carte du poids apporté à la sphère par particule créée, en fonction de la position de leur création (voxels sommés selon l’axe avant-arrière). La région vide (en blanc) entourant la cuve ne contient aucune donnée puisque aucune particule n’y a été créée.

Cette dernière carte met encore davantage en évidence la faible contribution des particules créées à l’entrée de la cuve. La contribution *totale* de cette région, sur la figure 55, semblait encore conséquente à cause du nombre élevé de particules créées. La contribution individuelle de ces particules est en réalité extrêmement faible.

On remarque également que, parmi les particules créées dans le faisceau, celles provenant de son bord droit contribuent davantage. Il s’agit des particules pour lesquelles l’angle de diffusion nécessaire pour atteindre la sphère est le plus faible, et ce sont donc celles dont le poids est le moins réduit par l’échantillonnage non-analogue de la direction.

Globalement, on constate dans cet exemple qu’il pourrait être préférable d’attendre qu’une particule passe d’elle-même l’obstacle de plomb avant d’utiliser le transport pseudo-déterministe, puisque les contributions des particules déterministes créées avant sont négligeables. La roulette russe basée sur la carte d’importance a alors ici pour objectif d’empêcher la création de particules pseudo-déterministes avant la plaque de plomb.

Au cours de la simulation, la valeur du voxel dans lequel une interaction pseudo-déterministe a lieu permet de savoir *a priori* quel poids il est possible d’attendre pour la particule qui sera créée. La roulette russe peut alors être appliquée en comparant ce poids attendu au poids seuil w_s , avant même de débiter la création de la particule. S’il s’avère que le poids de la particule, lors de son arrivée à la sphère, est tout de même très différent de la valeur attendue, alors la particule subira une roulette ou un splitting à ce moment-là.

On notera que la carte d’importance pourrait comporter jusqu’à trois dimensions supplémentaires pour tenir compte de l’énergie et de la direction des particules au moment de l’interaction. Cependant, le choix a été fait de n’utiliser que la position, afin de ne pas

trop complexifier le paramétrage. De plus, cette carte reste une estimation, qui sera d'autant plus précise que le nombre de particules créées dans chaque voxel est grand. Augmenter le nombre de dimensions accroît considérablement le nombre de particules nécessaires pour réaliser une estimation correcte et retarde ainsi l'application de la roulette.

Enfin, afin d'être calculée en temps réel durant la simulation, la carte d'importance est représentée par un objet dynamique dans le code. Or, dans Phoebe, ce type d'objet ne peut pas être partagé par plusieurs processeurs lors d'une utilisation en parallèle, et chaque processeur possède donc sa propre carte (qui est donc calculée plus lentement). À terme, il pourrait être préférable d'utiliser une carte statique, qui serait calculée par l'ensemble des processeurs dans une simulation préliminaire puis réutilisée en tant que fichier d'entrée supplémentaire. La première solution a cependant été choisie pour la facilité d'utilisation et d'implémentation.

6.4.2 Roulette russe basée sur la carte d'importance

Un voxel de la carte d'importance contient la moyenne w_I des poids que les particules créées à cette position portaient à leur arrivée à la sphère. Si on appelle W la variable aléatoire donnant le poids amené à la sphère par une particule créée dans ce voxel, alors w_I est une estimation de l'espérance de W . L'estimateur associé, dont une réalisation est w_I , sera noté \overline{W}_I .

Lorsqu'une diffusion a eu lieu, si le poids w_I pour sa position est inférieur au seuil w_S , la particule déterministe qui devrait être créée contribuera *probablement* trop peu à l'estimation. Une roulette est donc appliquée en comparant le poids attendu w_I au poids cible w_C . La probabilité de tuer la particule, $p_k = 1 - \frac{w_I}{w_C}$, est d'autant plus élevée que le poids attendu w_I est faible devant le poids cible w_C . La probabilité de survie sera notée $p_S = \frac{w_I}{w_C}$; cette probabilité est elle-même une réalisation de variable aléatoire $P_S = \frac{\overline{W}_I}{w_C}$ puisqu'elle dépend de la réalisation w_I de \overline{W}_I .

Si la roulette aboutit à l'élimination de la particule, alors celle-ci n'est simplement pas créée. Dans le cas contraire, elle est créée avec un poids multiplié par $\frac{w_C}{w_I}$. Dans tous les cas, la particule complémentaire est toujours éliminée si elle entre dans la sphère sans interagir.

Avec application de la roulette, la variable aléatoire donnant le poids d'une particule arrivant à la sphère est :

$$W' = \frac{W}{P_S} \mathbb{1}_{[0;P_S]}(U) \quad (202)$$

où U suit une loi uniforme sur $[0; 1]$. On peut alors vérifier que :

$$\mathbb{E}(W') = \mathbb{E}\left(\frac{W}{P_S} \mathbb{1}_{[0;P_S]}(U)\right) \quad (203)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(\frac{W}{P_S} \mathbb{1}_{[0;P_S]}(U) \mid P_S = p_S\right)\right) \quad (204)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(\frac{W}{p_S} \mathbb{1}_{[0;p_S]}(U)\right)\right) \quad (205)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}(W)\right) \quad (206)$$

$$= \mathbb{E}(W) \quad (207)$$

L'argument est basé ici sur le poids des particules entrantes, mais le même raisonnement

pourrait être mené en considérant leur contribution à l'estimation de la dose, à la manière de la section 4.4.3, de sorte à montrer qu'elle n'est pas non plus biaisée par cette procédure.

En pratique, l'estimation w_I de $\mathbb{E}(W)$ est arrêtée après la simulation d'un certain nombre d'histoires. En effet, une fois que la roulette commence à être utilisée pour empêcher la création de particules, il n'est plus possible de continuer à réaliser des tirages de W_I . La probabilité de survie d'une particule est alors fixée à p_S pour le reste de la simulation. L'espérance du poids d'une particule *survivant à la roulette*, une fois arrivée à la sphère, est alors non pas exactement w_C mais en réalité :

$$\mathbb{E}\left(\frac{W}{p_S} \mathbb{1}_{[0;p_S]}(U) \mid U \in [0;p_S]\right) = \mathbb{E}\left(\frac{W}{p_S}\right) = \frac{\mathbb{E}(W)}{w_I} w_C \quad (208)$$

Ici, w_I est l'estimation obtenue après un certain nombre d'histoires qui précèdent l'utilisation de la roulette liée à la carte d'importance. Plus elle est proche de $\mathbb{E}(W)$, et plus l'espérance du poids d'une particule à son arrivée est proche de w_C . Le choix du nombre d'histoires à réaliser pour calculer la carte, tout comme la position et le nombre de voxels, est laissé à l'utilisateur. Plus il est grand, plus l'estimation du poids attendu sera juste, et plus la roulette sera effectuée efficacement. En revanche, le temps nécessaire au calcul de la carte sera plus élevé et la roulette commencera donc à être utilisée plus tard au cours de la simulation.

Finalement, dans le cas où aucune particule n'a été créée dans un voxel donné durant le calcul de la carte, aucune roulette n'est effectuée dans celui-ci.

6.4.3 Splitting de la création de particules

La seconde technique auxiliaire basée sur la carte d'importance est une duplication de la création de la particule déterministe, qui peut s'apparenter à un splitting effectué avant la diffusion pseudo-déterministe.

Lorsque le poids attendu pour une diffusion w_I est supérieur à $9w_S$, alors n particules déterministes sont créées indépendamment avec un poids divisé par n . Le nombre de particules créées est choisi comme étant le rapport $n = \frac{w_I}{w_C}$ arrondi à l'entier le plus proche. Les poids des particules créées sont ainsi compris entre w_S et $9w_S$.

Le nombre de particules créées est une réalisation de la variable aléatoire $N = \frac{\overline{W_I}}{w_C}$. Si W'' est la variable aléatoire donnant le poids total des particules envoyées à la sphère lors de la diffusion après splitting, alors on a :

$$W'' = \sum_{j=1}^N \frac{W_j}{N} \quad (209)$$

Où les variables W_j suivent la densité de probabilité de W . On peut alors vérifier :

$$\mathbb{E}(W^n) = \mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^N \frac{W_j}{N}\right) \quad (210)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^N \frac{W_j}{N} \mid N = n\right)\right) \quad (211)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^n \frac{W_j}{n}\right)\right) \quad (212)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(n \frac{W}{n}\right)\right) \quad (213)$$

$$= \mathbb{E}\left(\mathbb{E}(W)\right) \quad (214)$$

$$= \mathbb{E}(W) \quad (215)$$

De même que pour la roulette, le tirage de N est réalisé seulement sur un certain nombre d'histoires et la valeur n obtenue est conservée pour le reste de la simulation. L'espérance du poids d'une particule arrivant à la sphère après splitting est alors :

$$\mathbb{E}\left(\frac{W}{n}\right) = \frac{\mathbb{E}(W)}{w_I} w_C \quad (216)$$

À nouveau, plus l'estimation w_I est proche de $\mathbb{E}(W)$ et plus le poids des particules à leur arrivée est proche de w_C .

6.4.4 Incidence sur le nombre de particules créées et leur poids

Après application de la roulette et du splitting via la carte d'importance, la carte du nombre de particules déterministes créées est largement modifiée. Elle est obtenue ici à partir de 10^8 particules et est donnée en figure 57 ci-dessous.

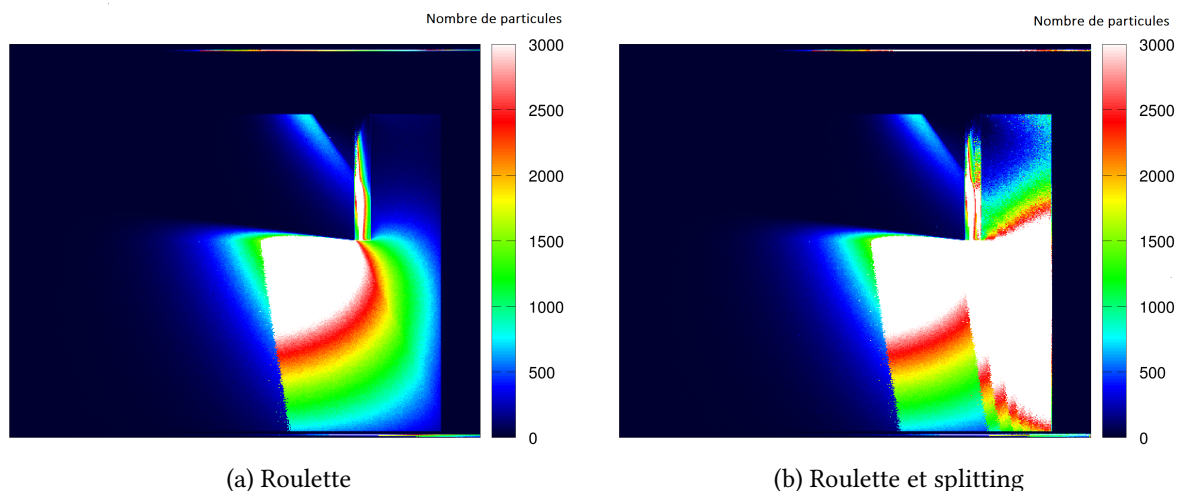


FIGURE 57 – Cartes du nombre de particules créées en fonction de la position après application de la roulette (a) et du couple roulette-splitting (b) via la carte d'importance (voxels sommés selon l'axe avant-arrière, taille 500×500 voxels).

La figure 57 (a) montre que la roulette supprime la majorité des émissions de particules déterministes dans la partie gauche du faisceau ainsi qu'avant la plaque de plomb. Une coupure nette révèle la limite de la région dans laquelle la valeur des voxels est située en dessous du seuil d'application de la roulette.

La figure 57 (b) met en évidence une augmentation considérable du nombre de particules créées dans le bord droit de la cuve après l'application du splitting. Il s'agit de particules de poids élevé (voir figure 56), qui sont donc divisées de nombreuses fois lors de leur émission. On constate également des discontinuités dues à la nature discrète du splitting, formant des bandes qui correspondent chacune à un nombre entier de particules créées par splitting. La bande la plus large, à gauche, correspond aux voxels dans lesquels les particules ne subissent ni roulette ni splitting.

La carte du poids apporté à la sphère par particule créée a également été calculée à partir de 10^8 particules, après application de la carte d'importance, et est donnée ci-dessous en figure 58. Pour comparaison, l'échelle de couleurs utilisée est la même que pour la figure 56.

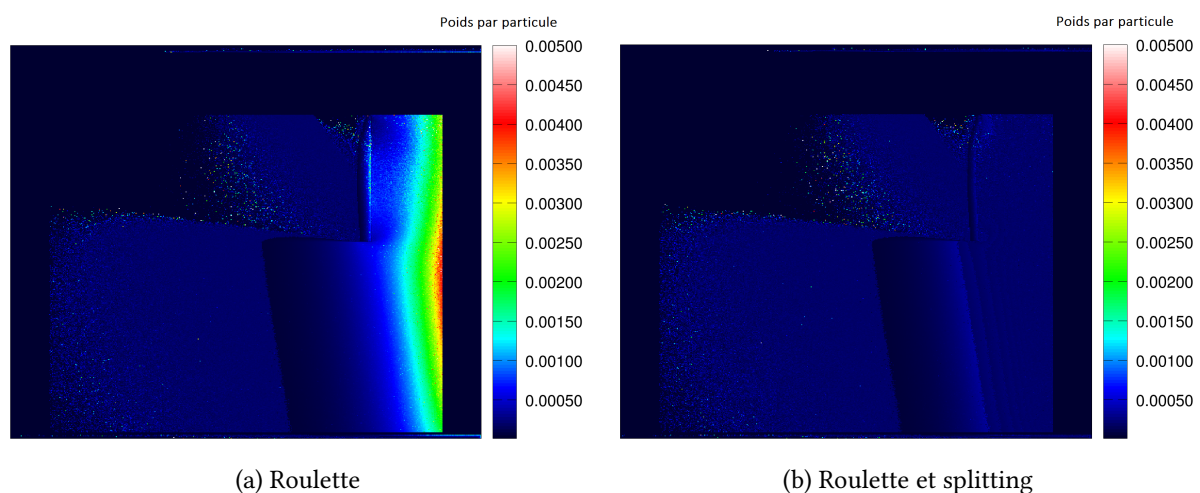


FIGURE 58 – Carte du poids apporté à la sphère par particule créée, en fonction de la position après application de la roulette (a) et du couple roulette-splitting (b) via la carte d'importance (voxels sommés selon l'axe avant-arrière, taille 500×500 voxels).

On constate sur la figure 58 (a) que toutes les particules créées dans les régions subissant la roulette (la partie gauche de la cuve) portent en moyenne le même poids lors de leur arrivée à la sphère, quelle que soit la position de leur création.

Après application du splitting sur les particules de poids les plus élevés (figure 58 (b)), le poids moyen des particules créées dans un voxel, à leur arrivée à la sphère, est approximativement le même pour l'ensemble de la carte.

L'application de ces deux techniques permet de faire en sorte que, pour chaque voxel, les particules déterministes créées apportent chacune, en moyenne, un poids équivalent à la sphère.

Toutefois, même si la moyenne est une indication du poids attendu, il s'agit seulement d'un résumé : les poids des particules créées dans chaque voxel suivent en réalité une certaine distribution, et peuvent tout de même avoir un poids très différent de la moyenne. L'objectif de

la carte d'importance est simplement de réduire la fréquence de tels évènements, pour lesquels la roulette russe et le splitting peuvent tout de même être utilisés à l'entrée de la sphère.

Les dernières techniques auxiliaires, décrites dans la section suivante, s'apparentent à une application partielle ou totale du transport pseudo-déterministe sur des interactions autres que les diffusions Compton ou Rayleigh. Ces techniques ont à la fois pour but d'éviter l'entrée dans la sphère de particules analogues, mais également de maximiser le nombre d'applications du transport pseudo-déterministe.

6.5 Application à d'autres types d'interactions

6.5.1 Émissions par fluorescence

Le transport pseudo-déterministe étant jusqu'ici appliqué uniquement aux diffusions, les photons issus de fluorescence peuvent entrer et interagir dans la sphère de manière entièrement analogue. De plus, dans l'implémentation actuelle dans Phoebe, la réaction de relaxation d'un atome, qui crée les photons de fluorescence, relève de la classe `material`, à laquelle le transport pseudo-déterministe n'a pas accès puisqu'il se limite aux processus de transport des photons.

En revanche, chaque photon créé par relaxation commence son transport par un échantillonnage du pas à parcourir, géré par la classe alternative du transport pseudo-déterministe : il est alors possible d'agir sur sa direction et son pas en activant le transport pseudo-déterministe lors de sa sortie de la pile de particules secondaires, juste avant d'effectuer l'échantillonnage du pas. Cela revient, comme dans le cas habituel, à utiliser le transport pseudo-déterministe après une interaction. La différence avec une autre interaction est que, dans le cas de la fluorescence, il n'est pas nécessaire de connaître les caractéristiques de la particule qui a causé la création du photon.

Ainsi, une seconde fonction de transport pseudo-déterministe est placée dans la fonction `jump`, et est utilisée avant l'échantillonnage du pas lorsqu'une particule est issue de relaxation atomique et réalise son premier pas depuis sa création. De même que lorsque le transport pseudo-déterministe est utilisé au moment d'une diffusion, si le photon est dirigé vers la sphère, il devient une particule complémentaire et ne peut plus entrer dans la sphère au pas suivant. Une particule déterministe est créée, sa direction est échantillonnée vers la sphère et son poids est réduit du rapport de la densité de probabilité liée à la direction de diffusion dans le cas analogue $f(\mu, \phi)$ sur la densité de probabilité arbitraire utilisée ici pour l'échantillonnage $f^*(\eta, \phi')$.

Dans le cas de la fluorescence, l'émission est isotrope. L'angle ϕ est échantillonné uniformément sur $[0; 2\pi]$ et $\mu = \cos \theta$ est échantillonné uniformément sur $[-1; 1]$. Le facteur

correctif du poids lié à la direction d'émission est alors :

$$\frac{f(\mu, \phi)}{f^*(\eta, \phi')} = \frac{f(\mu)f(\phi)}{f^*(\eta)f^*(\phi')} \quad (217)$$

$$= \frac{f(\mu) \frac{1}{2\pi}}{f^*(\eta) \frac{1}{2\pi}} \quad (218)$$

$$= \frac{f(\mu)}{f^*(\eta)} \quad (219)$$

$$= \frac{1}{2f^*(\eta)} \quad (220)$$

De plus, l'énergie de la particule émise ne dépend pas de sa direction. La particule déterministe conserve donc l'énergie de la particule d'origine. Finalement, les particules déterministes ainsi créées sont soumises à la roulette et au splitting de la même manière que celles issues de diffusions.

6.5.2 Annihilation et bremsstrahlung

En plus de la fluorescence, des photons peuvent être émis par bremsstrahlung ou par annihilation des positons. Dans les deux cas, la densité de probabilité liée à la direction d'émission des photons dépend de l'énergie et de la direction des particules qui sont à l'origine de l'interaction (respectivement l'électron ou le positon). Or, la classe de transport pseudo-déterministe ne s'applique qu'au transport des photons : la méthode ne peut pas s'appliquer à l'émission de photons résultant d'interactions d'autres particules. Il n'est pas possible, non plus, d'appliquer le transport pseudo-déterministe lorsque le photon est sorti de la pile, à l'instar des photons issus de fluorescence, car les caractéristiques de la particule qui en est à l'origine sont inconnues. La fonction $f(\mu, \phi)$ ne peut alors pas être évaluée par la fonction de transport pseudo-déterministe, et il n'est donc pas possible, uniquement via les processus du photon, d'attribuer à la particule déterministe le facteur correctif du poids inhérent à la direction de diffusion. On est alors limité, ici, à utiliser uniquement la seconde partie du transport pseudo-déterministe : lorsque la particule est *déjà dirigée vers la sphère* à sa sortie de la pile, elle peut y être amenée de manière déterministe.

Avant l'échantillonnage du pas dans la fonction `jump`, un nouvel appel de la fonction de transport pseudo-déterministe est réalisé pour les photons provenant d'un bremsstrahlung ou d'une annihilation, réalisant leur premier pas à la sortie de la pile, et étant dirigés vers la sphère. Dans ce cas, la particule actuelle devient complémentaire, puis la particule déterministe est créée en conservant la même direction et le même poids. Elle sera amenée de manière déterministe à la surface de la sphère, et son poids sera réduit à son arrivée en fonction des milieux traversés.

La création de ces particules déterministes n'est affectée que par les roulettes russes. Le splitting serait redondant avec celui effectué à l'entrée de la sphère, puisque toutes les particules créées suivraient exactement le même chemin.

6.5.3 Interaction Delta (effet photoélectrique)

La dernière possibilité d'entrer dans la sphère, pour un photon analogue, est liée à l'interaction photoélectrique. En temps normal, lorsque le transport pseudo-déterministe

est utilisé, la particule complémentaire possède un statut indiquant qu'elle doit être tuée à son entrée dans la sphère. Ce marqueur doit être présent seulement au cours du pas suivant l'interaction, et il est donc supprimé si la particule interagit avant d'entrer dans la sphère. Il existe alors deux possibilités. Elle peut être diffusée à nouveau par interaction Compton ou Rayleigh; dans ce cas, le transport pseudo-déterministe est utilisé une nouvelle fois et le marqueur lui est immédiatement réattribué si elle est dirigée vers la sphère. Elle peut également être absorbée par effet photoélectrique ou disparaître par création de paire. Dans tous les cas, aucun photon analogue ne pourrait, a priori, entrer dans la sphère.

Toutefois, il existe une possibilité que la particule ne soit pas absorbée à la suite d'un effet photoélectrique. La fonction `jump` utilise, en effet, une section efficace légèrement surestimée pour l'effet photoélectrique, afin de faciliter son calcul. Pour corriger cette modification des lois physiques, un photon subissant un effet photoélectrique a une certaine probabilité de continuer son chemin sans réellement interagir (l'interaction est alors qualifiée d'interaction Delta). Or, le poids des particules déterministes est proportionnel à leur probabilité de non-interaction, qui dépend de cette section efficace surestimée. On pourrait en fait reformuler cette probabilité comme «la probabilité de ne pas interagir, y compris par interaction Delta, avant d'arriver à la sphère». Ainsi, la condition à laquelle la particule complémentaire est tuée est en réalité «elle atteint la sphère sans interagir, y compris par interaction Delta». Cela signifie qu'une interaction Delta doit être considérée comme une interaction à part entière, donnant lieu à la suppression du marqueur d'une particule complémentaire dirigée vers la sphère, puisque sa probabilité est comprise dans les sections efficaces utilisées dans l'échantillonnage du pas.

Mais, puisqu'il ne s'agit pas d'une diffusion, le transport pseudo-déterministe n'est pas utilisé à nouveau, et, puisque la particule n'est pas non plus absorbée, elle peut librement entrer dans la sphère et y interagir. Pour limiter cette source de variance, le transport pseudo-déterministe peut être appliqué partiellement, de la même manière que pour les photons issus de bremsstrahlung ou d'annihilation. Après l'interaction photoélectrique, si le photon n'a pas été absorbé et qu'il est dirigé vers la sphère, il devient complémentaire et un photon déterministe est créé puis amené à la sphère de manière déterministe sans modifier sa direction.

À nouveau, la création de ces particules est soumise uniquement à la roulette russe, pour les mêmes raisons que dans le cas du bremsstrahlung et de l'annihilation.

6.6 Conclusion

Le transport pseudo-déterministe n'est pas une technique parfaite, et son apport sur l'efficacité de l'estimation dépend grandement du problème traité. Souvent, une perte de temps importante est induite par le suivi de nombreuses particules déterministes de poids négligeables. Un ensemble de techniques ont donc été ajoutées au transport pseudo-déterministe pour améliorer autant que possible l'efficacité, soit par la diminution du temps de calcul (via la roulette russe), soit par une baisse de la variance (via le `splitting`).

Les différentes techniques auxiliaires, qui peuvent être utilisées soit à la création des particules déterministes, soit au cours de leur transport jusqu'à la sphère, modifient grandement la distribution des poids et le nombre de particules créées. Plus généralement, elles permettent de s'exempter de la création puis du suivi de nombreuses particules de poids très faibles et augmentent le nombre de particules pouvant interagir dans la sphère lorsque

leur poids est suffisamment élevé. Finalement, l'application partielle ou totale du transport pseudo-déterministe aux autres interactions du photon devrait permettre d'améliorer l'efficacité lorsque les diffusions ne sont pas la principale source de dépôts d'énergie dans la sphère, et de limiter les sauts de variance dus à la présence dans la sphère de particules analogues.

Néanmoins, toutes ces techniques requièrent un temps de calcul supplémentaire, que ce soit pour l'échantillonnage des roulettes russes, les comparaisons de poids, le suivi des nouvelles particules créées par le splitting, ou encore le calcul de la carte d'importance. Ces calculs additionnels viennent compenser une partie du gain d'efficacité induit par le transport pseudo-déterministe, et il sera nécessaire de tester quantitativement leur apport. Le chapitre suivant est ainsi consacré à la caractérisation de différentes versions de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe, de la version basique sans aucune technique auxiliaire jusqu'à la version finale. Après des tests préliminaires de fonctionnement, cette caractérisation est d'abord réalisée par une comparaison d'efficacité sur une série de simulations de test, puis par une comparaison à la méthode DXTRAN du code MCNP.

7 Caractérisation et validation numérique du code

7.1 Introduction

L'absence théorique de biais dans la méthode du transport pseudo-déterministe a été vérifiée dans le chapitre 6, puis la réduction de variance a été implémentée dans Phoebe. Il est toutefois nécessaire de s'assurer de l'absence réelle de biais (pouvant provenir de l'implémentation elle-même) et donc à employer la méthode dans des simulations au cours desquelles la concordance des résultats avec leur équivalent analogue doit être vérifiée. Le travail présenté dans ce chapitre vise donc, d'abord, à contrôler la bonne application du transport pseudo-déterministe et l'absence de biais. Un second objectif est de quantifier l'apport de la méthode sur l'efficacité du calcul, et d'examiner les paramètres influant sur cet apport.

Les techniques auxiliaires, quant à elles, ont permis de grandement modifier la distribution des poids des particules déterministes qui atteignent la sphère, et d'appliquer la méthode plus fréquemment en l'étendant au-delà des diffusions. Ce chapitre vise également à quantifier leur éventuel effet sur l'efficacité de la simulation, tout en s'assurant à nouveau de l'absence de biais introduits par leur implémentation.

La première section présente une série de tests préliminaires destinés à contrôler de manière qualitative le bon fonctionnement du code. Ensuite, un ensemble de 54 simulations différentes est utilisé avec et sans transport pseudo-déterministe pour tester l'absence de biais et obtenir une première idée du gain en efficacité apporté par la méthode et par chaque technique supplémentaire. Enfin, la deuxième section présente une brève comparaison du transport pseudo-déterministe dans Phoebe avec la méthode DXTRAN de MCNP, en comparant l'apport de chaque méthode au code dans lequel elle est implémentée.

7.2 Étude de l'effet du transport pseudo-déterministe sur la dose et l'efficacité

7.2.1 Tests préliminaires du transport pseudo-déterministe

Cette section présente les résultats obtenus avec le transport pseudo-déterministe dans Phoebe, éventuellement couplé aux techniques auxiliaires présentées en 6.3 et 6.4, dans des cas fictifs destinés à vérifier le bon fonctionnement de l'implémentation de la méthode.

Trajet des particules

Un premier test est réalisé dans le but de vérifier de manière qualitative la bonne application de la méthode lors des diffusions des photons. Une configuration de simulation simple, représentée sur la figure 59 ci-après, est utilisée à cet effet. Le transport pseudo-déterministe est appliqué ici en utilisant uniquement les roulettes en sortie de la sphère pour plus de clarté.

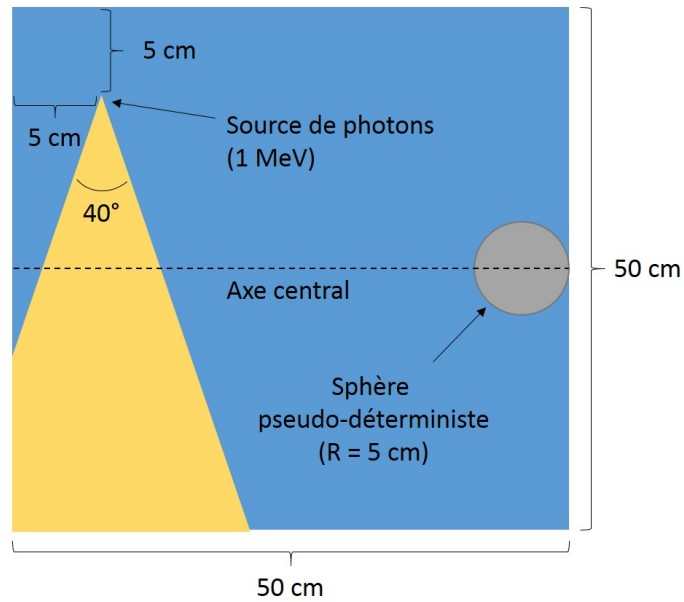


FIGURE 59 – Illustration de la configuration utilisée pour valider le bon fonctionnement de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.

On considère une cuve à eau cubique de 50 cm de côté. Une source de photons de 1 MeV est placée à l'intérieur de cette cuve, à 5 cm du bord gauche et à 5 cm de la surface, et émet vers le bas selon un cône de demi angle d'ouverture 20° . Une sphère pseudo-déterministe de rayon 5 cm est placée sur le bord droit de la cuve. L'ensemble des éléments est centré par rapport à l'axe avant-arrière. On s'intéresse ici au chemin parcouru par les photons au cours de quelques *showers*, afin de visualiser le trajet et les poids des différentes particules produites. Le résultat obtenu pour 100 photons initiaux est présenté ci-dessous en figure 60.

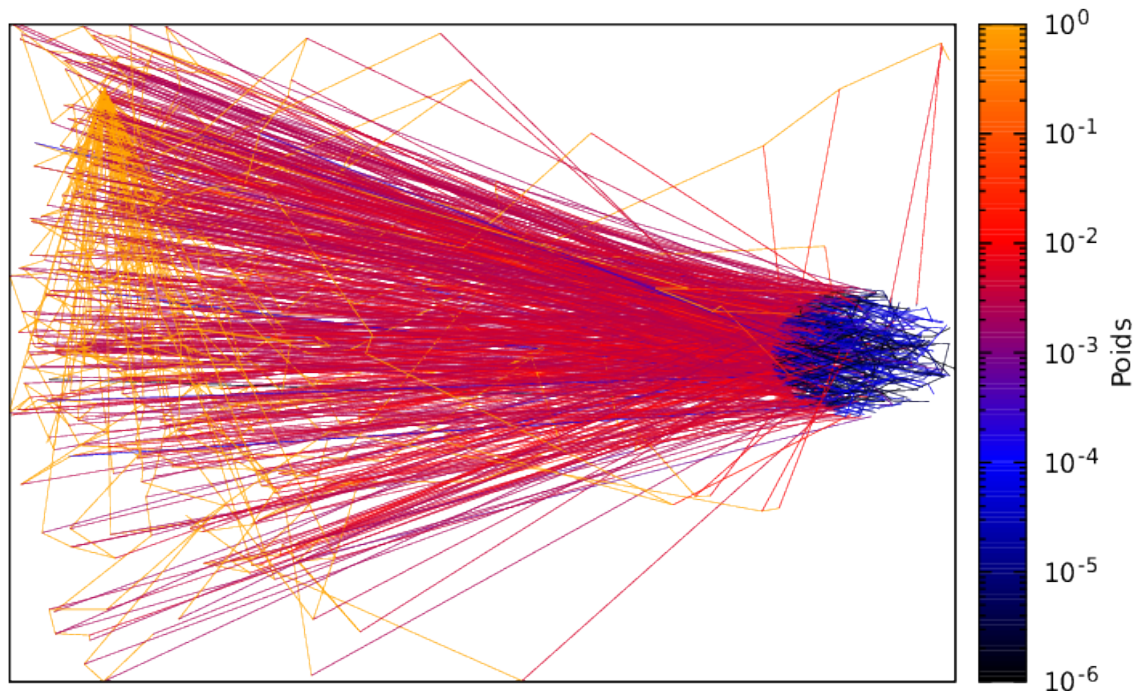


FIGURE 60 – Exemple de traces des particules analogues et déterministes et leur poids associé, pour l'émission de 100 photons primaires dans la configuration de la figure 59.

Chaque segment de droite relie deux interactions successives d'un photon, et représente donc un pas effectué par la particule. La couleur correspond au poids du photon au début du pas. Les lignes orange représentent les trajets des photons analogues, de poids 1, qui sont émis par la source. Chaque changement de direction correspond à une diffusion, et on peut constater que chaque diffusion donne naissance à un photon déterministe qui part en ligne droite jusqu'à la surface de la sphère. La couleur de ce trajet correspond au poids donné après l'échantillonnage de la direction, qui semble bien réduit avant le pas réalisé vers la sphère. Les trajets visibles à l'intérieur de la sphère, quant à eux, sont les photons déterministes arrivés à destination. Leur poids est très largement inférieur à celui des photons en cours de transport déterministe, ce qui s'accorde avec la multiplication de leur poids par la probabilité de non-interaction jusqu'à la sphère. La méthode, ici, semble être bien appliquée lors des diffusions et réduire les poids de manière appropriée, au moins qualitativement.

Carte de dose et carte d'erreur

On s'intéresse maintenant à la carte de dose et à l'incertitude sur les doses obtenues sur le cas de la figure 59 décrit précédemment. Le résultat, obtenu après 10 minutes de calcul sur 160 processeurs, est donné ci-dessous sur la figure 61.

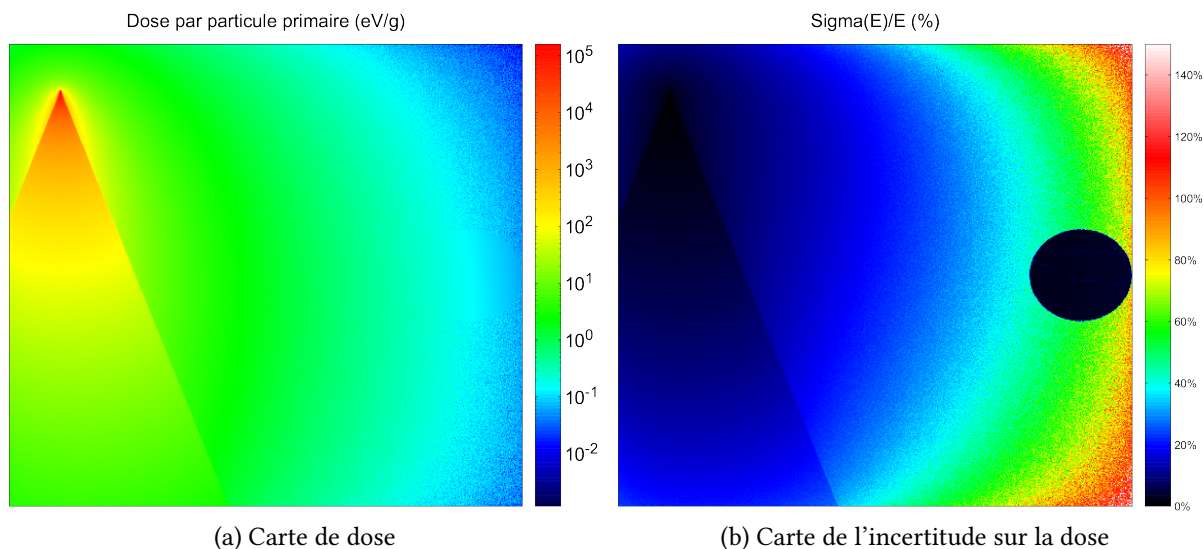


FIGURE 61 – Exemple de l'effet du transport pseudo-déterministe sur une carte de dose et sur la carte d'incertitude associée dans la configuration de la figure 59 (500×500 pixels, une coupe d'un centimètre est réalisée au centre de l'axe avant-arrière).

On constate, sur la carte de dose en (a), que la sphère n'est qu'à peine visible. Sa présence ne modifie pas le gradient de dose, ce qui laisse à penser qu'elle n'influence pas la dose estimée. En revanche, l'aspect du gradient de dose à l'intérieur de la sphère est moins bruité, ce qui semble indiquer une variance plus faible dans cette région. C'est ce que l'on peut vérifier sur la carte de l'incertitude associée à cette estimation (b) : l'incertitude dans la sphère est largement plus faible que dans les régions environnantes, et le transport pseudo-déterministe semble bien, ici aussi, réduire la variance.

Ce résultat ne renseigne toutefois pas quantitativement sur le bénéfice apporté par la méthode par rapport à la situation analogue, ni sur un éventuel biais dans l'estimation. Le test suivant a ainsi pour but de réaliser une première vérification, à nouveau sur un cas simple, de l'accord des résultats et du gain d'efficacité par rapport au calcul analogue.

Profils de dose

On considère à nouveau le cas représenté sur la figure 59 et étudié précédemment, dans lequel le rayon de la sphère est réduit à 3 cm, et son centre décalé à 10 cm de la face droite de la cuve. Cette configuration est représentée sur la figure 62.

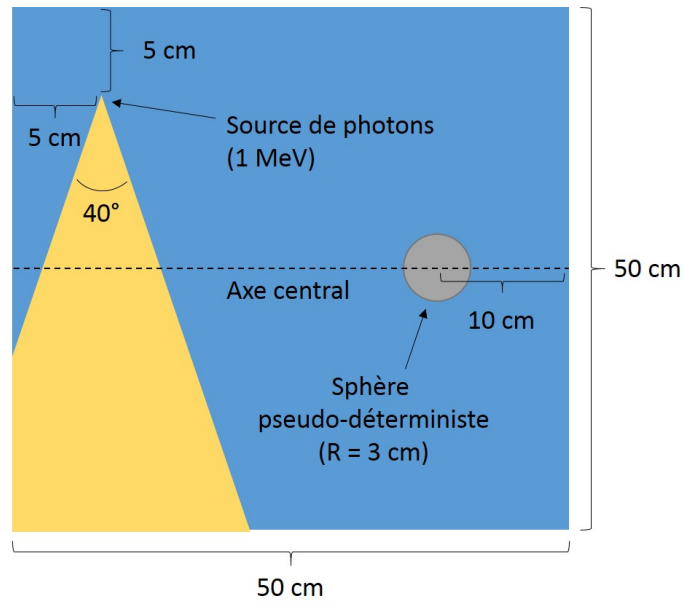


FIGURE 62 – Illustration de la configuration de test utilisée pour l’estimation d’un profil de dose lors de la validation du bon fonctionnement de l’implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebé.

On s’intéresse cette fois au profil de dose le long d’un axe reliant le centre du faisceau au bord de la cuve. L’axe passe par le centre de la face droite de la cuve, et donc par la sphère pseudo-déterministe. La dose est estimée le long d’un profil entre l’axe du faisceau et le bord de la cuve, au cours d’un calcul rapide de deux minutes sur un processeur (suffisant pour avoir une incertitude de l’ordre de 10 % dans la sphère). Le résultat obtenu est donné ci-dessous sur la figure 63 pour un calcul analogue et un calcul avec transport pseudo-déterministe de même durée.

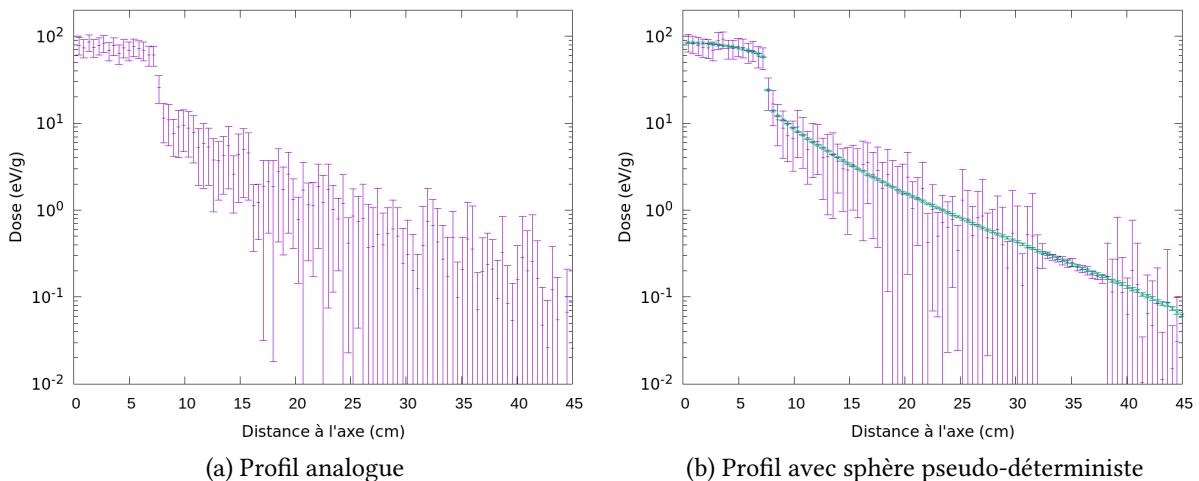


FIGURE 63 – Exemple d’un profil de dose calculé dans la configuration de la figure 62, sans (a) et avec (b) le transport pseudo-déterministe. La courbe en vert est le résultat analogue obtenu sur un temps 4800 fois plus important.

Le profil (a) montre la décroissance exponentielle de la dose avec la distance au champ, ainsi que l'augmentation progressive de l'incertitude qui y est associée. Le profil (b) est similaire, mais présente une forte réduction de l'incertitude à l'emplacement de la sphère pseudo-déterministe. La série de points en vert, sur la figure 63 (b), est le résultat de la simulation analogue réalisée en une heure sur 160 processeurs (soit un temps de calcul effectif 4800 fois plus élevé). Elle coïncide avec celle obtenue avec le transport pseudo-déterministe dans le champ, mais également au niveau de la sphère où l'accord est très bon. L'implémentation de la méthode, dans ce cas, ne semble pas introduire de biais dans l'estimation de la dose, et semble diminuer considérablement la variance.

La figure 64, ci-dessous, renseigne sur l'évolution de l'incertitude obtenue sur ce profil dans le cas analogue et dans le cas du transport pseudo-déterministe.

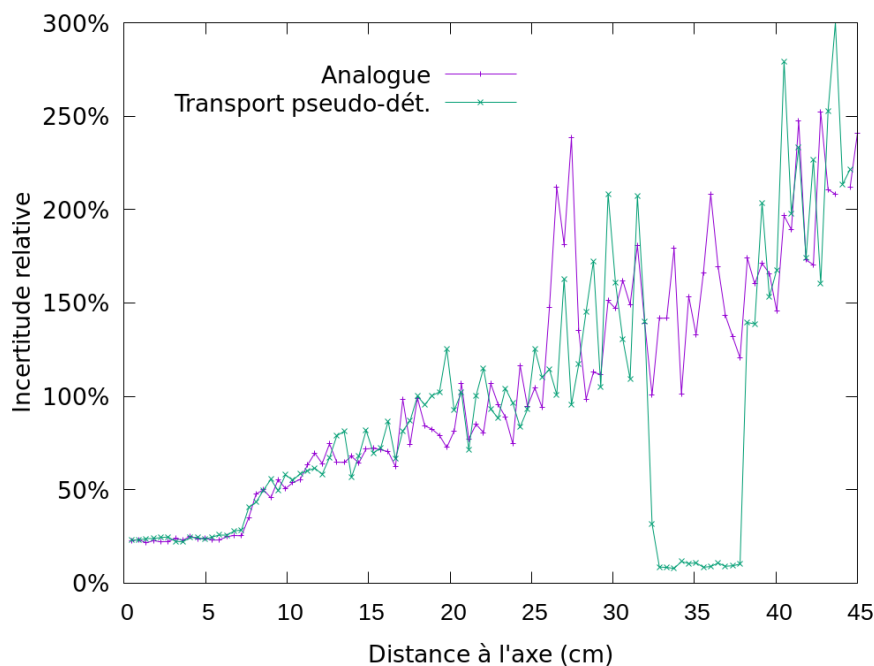


FIGURE 64 – Évolution de l'incertitude relative sur la dose estimée le long d'un profil dans la configuration de la figure 62, avec et sans le transport pseudo-déterministe.

Dans le cas analogue, l'incertitude relative est la plus faible dans le champ, mais augmente rapidement à mesure que l'on s'en éloigne. En revanche, lorsque le transport pseudo-déterministe est utilisé, l'incertitude est largement réduite à l'intérieur de la sphère. Elle est même, ici, inférieure à l'incertitude obtenue dans le faisceau. On constate également que, dans cet exemple, l'utilisation de la réduction de variance ne dégrade pas de manière significative l'incertitude en dehors de la sphère (notamment dans le champ).

Notons qu'il serait possible ici d'obtenir un résultat précis relativement rapidement sans avoir recours au transport pseudo-déterministe. La configuration de simulation utilisée est toutefois très simple et nous verrons, lors de la simulation d'un accélérateur linéaire médical en 8.3, que le calcul peut être considérablement plus long dans des conditions plus réalistes et que le transport pseudo-déterministe est alors indispensable.

Ces quelques vérifications permettent d'illustrer et de vérifier sommairement le bon fonctionnement de l'implémentation. Des tests plus fins et automatisés ont été mis en place

pour valider le code et chaque technique auxiliaire de manière indépendante dans des cas plus complexes. La section suivante décrit la configuration utilisée à cet effet.

7.2.2 Configuration de test automatisé

Les tests réalisés sur le code ont été mis en place avant tout dans le but de vérifier la conformité de la dose estimée en utilisant le transport pseudo-déterministe avec la dose obtenue en simulation analogue, ou éventuellement l'accord entre deux versions du transport pseudo-déterministe (lors de l'ajout d'une technique auxiliaire). Ils permettent par la même occasion d'examiner l'accélération du calcul en comparant l'efficacité obtenue pour chaque version du code, ainsi que la dépendance de cette accélération avec les paramètres de la simulation.

Pour cela, on définit une configuration de simulation de base, dans laquelle quatre paramètres peuvent varier pour constituer de nouvelles situations à simuler :

- L'énergie de la source de photons,
- Le rayon de la sphère pseudo-déterministe,
- La distance séparant la sphère du faisceau,
- L'énergie d'absorption des électrons.

Cette configuration est illustrée ci-dessous sur la figure 65.

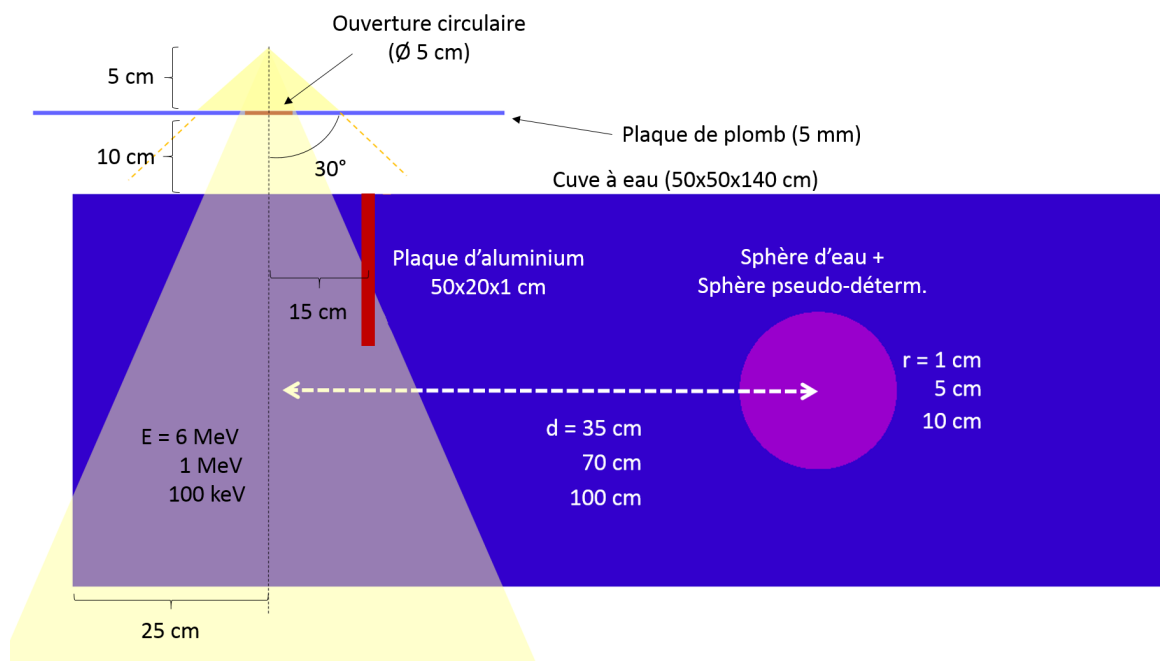


FIGURE 65 – Schéma de la configuration utilisée pour les tests des différentes versions de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe.

La géométrie de calcul est constituée d'une cuve à eau de $50 \times 50 \times 140 \text{ cm}^3$ placée dans l'air. Une source de photons monoénergétique est placée à 15 cm au-dessus de la cuve, à 25 cm de son bord gauche, et est centrée par rapport à l'axe avant-arrière. La source est conique et

dirigée vers la cuve, et émet avec un demi-angle d'ouverture de 30°. Son énergie peut prendre trois valeurs : 6 MeV, 1 MeV et 100 keV. À 5 cm en dessous de la source, une plaque de plomb de 30×30×0,5 cm³ collimate le faisceau. La plaque est percée en son centre d'un trou circulaire de 6 cm de diamètre. Une plaque d'aluminium de dimensions 50×20×1 cm³, située à 15 cm de l'axe du faisceau, sert d'obstacle pour les photons diffusant dans la cuve. Une sphère d'eau de rayon variable, dans laquelle est estimée la dose par photon émis, est placée dans la cuve à droite du faisceau. Son rayon peut être de 1 cm, 5 cm ou 10 cm. La distance entre le centre de la sphère et l'axe du faisceau peut être de 35 cm, 70 cm ou 100 cm. Enfin, l'énergie d'absorption des électrons peut être soit configurée par défaut (égale à 1 % de l'énergie de la source), soit 10⁹ MeV, auquel cas les électrons sont absorbés sur leur lieu de création. L'objectif est d'évaluer l'influence de leur suivi sur le gain d'efficacité, puisqu'ils ne sont pas soumis au transport pseudo-déterministe. Au total, toutes les combinaisons de paramètres possibles représentent 3×3×3×2 = 54 configurations simulées.

Pour chacune des configurations, une sphère pseudo-déterministe est centrée sur la sphère d'eau. Puisqu'elle se trouve dans un milieu diffusant, des sauts de variance sont relativement probables et il s'agit d'un cas plutôt défavorable à l'application du transport pseudo-déterministe. Cette configuration permet toutefois d'évaluer les différentes versions du code dans des conditions plus difficiles, dans lesquelles les techniques auxiliaires ont un réel intérêt. Le rayon de la sphère interne est égal à celui de la sphère d'eau, et le rayon de la sphère externe est toujours égal à 1,5 fois le rayon interne (respectivement 1,5 cm, 7,5 cm et 15 cm). La valeur de Q est toujours égale à 5. Lorsque les techniques auxiliaires sont utilisées, le calcul de la carte d'importance se fait sur les 10⁶ premières particules émises par la source. La carte recouvre entièrement la cuve et la plaque de plomb et contient 50×20×20 voxels.

À ces simulations s'ajoutent 54 simulations analogues, utilisant les mêmes paramètres mais sans aucune réduction de variance. Chaque simulation (analogue ou non) est réalisée sur une durée de 3 heures en parallèle sur 20 processeurs.

Pour chaque combinaison de paramètres, on vérifie la compatibilité de la dose obtenue dans la sphère avec celle de référence (qui peut être la simulation analogue ou une autre version du transport pseudo-déterministe). On considère que les valeurs sont compatibles si les barres d'erreur se recoupent (l'incertitude donnée est égale à trois écarts-types). On calcule ensuite le rapport des efficacités R :

$$R = \frac{\epsilon_{pseudo-deterministe}}{\epsilon_{reference}} \quad (221)$$

Pour toutes les simulations utilisant un paramètre donné (par exemple, toutes les simulations dans lesquelles le rayon de la sphère vaut 1 cm), on calcule le R moyen et le R médian. La médiane est calculée notamment parce qu'elle peut donner une meilleure évaluation de l'effet de la technique lorsque les résultats sont très disparates. Ce peut être le cas notamment à cause d'éventuels sauts de variance, ou lorsqu'une technique n'impacte que certains cas particuliers parmi les 54 simulations étudiées.

7.2.3 Résultats sans techniques auxiliaires

La première série de tests utilise la méthode du transport pseudo-déterministe sans aucune technique auxiliaire (qu'on appellera version minimale). Les rapports d'efficacité obtenus sont donnés dans le tableau 2 ci-après.

On notera que les résultats suivants utilisent tous la méthode du transport pseudo-déterministe appliquée à toutes les diffusions. Toutefois, elle a d'abord été implémentée sur la diffusion Compton seule avant d'être appliquée à la diffusion Rayleigh. Cet ajout a permis de gagner très largement en efficacité, en particulier à basse énergie lorsque la diffusion Rayleigh devient plus fréquente.

TABLE 2 – Résultats obtenus pour chaque paramètre en comparant la simulation avec transport pseudo-déterministe minimale à la simulation analogue.

Paramètre	Valeur	R moyen	R médian
Énergie de la source	6 MeV	0.76	0.31
	1 MeV	0.49	0.17
	100 keV	0.75	0.29
Distance au faisceau	35 cm	0.28	0.13
	70 cm	0.41	0.17
	100 cm	1.34	0.50
Électrons suivis	oui	1.09	0.70
	non	0.25	0.09
Rayon de la sphère	1 cm	1.00	0.30
	5 cm	0.43	0.17
	10 cm	0.58	0.25
Moyenne/médiane globale		0.66	0.24

Dans cette première série de simulations, les doses obtenues avec le transport pseudo-déterministe sont compatibles avec leur équivalent analogue. Cependant, un grand nombre de résultats analogues présentent une forte incertitude. Notamment, une simulation obtient une dose nulle après les trois heures de calcul, indiquant qu'aucune particule n'a atteint la sphère. Toutefois, la même série de simulations analogues réalisées sur une durée de 10 heures montre un résultat similaire au niveau de l'accord des doses estimées, avec 52 cas compatibles sur 53 (plus un cas sans résultat analogue).

Dans l'ensemble des autres cas traités ci-dessous et pour chaque version du code testée par la suite, la très grande majorité des doses sont compatibles avec leur référence respective. Cet aspect ne sera donc pas mentionné à nouveau par la suite.

Malgré la bonne compatibilité des résultats, l'efficacité est améliorée dans seulement 11 cas sur 54. La moyenne des rapports d'efficacité est de 0,66 (avec un rapport médian de 0,24). Le rapport le plus bas est de 0,004, et le plus haut est de 4,2. Il est évident que le transport pseudo-déterministe, appliqué seul, dégrade l'efficacité dans la plupart des cas simulés ici. Cette diminution peut très probablement s'expliquer par le trop grand nombre de particules déterministes suivies, qui ralentissent considérablement le calcul. Le même effet est observé en prenant pour référence l'ensemble des simulations analogues réalisées sur 10 heures.

Il est difficile d'observer une tendance claire avec la variation des paramètres. Il semble tout de même que le rapport d'efficacité augmente lorsque la sphère s'éloigne du faisceau, et est plus important lorsque les électrons sont suivis (l'effet est surtout visible sur le rapport médian). Dans ce dernier cas, il est possible que, puisque les électrons représentent une part plus importante du temps de simulation, l'efficacité soit moins dégradée par le transport

pseudo-déterministe car il est utilisé moins fréquemment.

7.2.4 Effet des roulettes russes et splittings

Cette section présente le résultat de la série de simulations décrite en 7.2.2 lors de l'utilisation des techniques auxiliaires liées aux roulettes russes et au splitting, pour plusieurs combinaisons de techniques.

Couple roulette/splitting à l'entrée de la sphère et roulette en sortie

La première combinaison de techniques auxiliaires testée est l'application du couple «roulette russe/splitting» sur les photons déterministes entrant dans la sphère, selon l'implémentation définie en sections 6.3.1 et 6.3.2. À celui-ci s'ajoute la roulette russe pour les particules sortant de la sphère, dont les détails sont donnés en section 6.3.3, ajoutée notamment pour éliminer en sortie le surplus de photons causé par le splitting. Les résultats sont donnés dans le tableau 3, dans lequel les efficacités sont comparées à celles obtenues avec la méthode du transport pseudo-déterministe sans techniques auxiliaires.

TABLE 3 – Résultats obtenus en comparant la simulation avec roulette et splitting en entrée puis roulette en sortie de la sphère, par rapport à la méthode minimale (sans technique complémentaire).

Paramètre	Valeur	<i>R</i> moyen	<i>R</i> médian
Énergie de la source	6 MeV	310.0	28.3
	1 MeV	586.8	98.0
	100 keV	41.9	26.8
Distance au faisceau	35 cm	346.8	36.4
	70 cm	440.5	55.6
	100 cm	151.4	17.4
Électrons suivis	oui	102.1	26.8
	non	523.7	76.8
Rayon de la sphère	1 cm	850.2	182.9
	5 cm	65.4	52.6
	10 cm	23.1	14.4
Moyenne/médiane globale		312.9	36.4

L'application de la roulette russe et du splitting aux frontières de la sphère améliore considérablement l'efficacité dans l'ensemble des simulations, avec un rapport d'efficacité moyen de 312 et un rapport médian de 36,4 par rapport au transport pseudo-déterministe appliqué seul. Cette version de la méthode ne diminue notamment l'efficacité que dans un seul cas sur 54, et permet une augmentation allant jusqu'à un facteur supérieur à 3500.

Il semble que l'amélioration de l'efficacité soit ici plus importante pour les énergies élevées. Il est possible qu'à plus haute énergie, le temps nécessaire au suivi des photons jusqu'à leur absorption étant plus élevé, la roulette russe permette un gain de temps plus important qu'à basse énergie.

L'apport de la roulette et du splitting est également plus important lorsque la sphère est placée à 70 cm du faisceau que lorsqu'elle se trouve à 35 cm. Cette tendance s'observe également si les simulations sont réalisées sans le splitting. Cet écart pourrait être dû à une différence dans la distribution des poids des photons entrant dans la sphère : lorsque la sphère est plus proche du faisceau, les poids des particules déterministes pourraient être davantage similaires entre eux que lorsque la sphère est éloignée, et la roulette serait alors moins utile.

Cette hypothèse est testée en utilisant la configuration utilisée jusqu'alors, décrite en 7.2.2, pour une sphère de 5 cm de rayon placée à 35 cm puis à 100 cm de l'axe d'un faisceau de photons de 100 keV. On s'intéresse à la distribution des poids des photons déterministes entrant dans la sphère en l'absence de techniques auxiliaires, pour les deux distances sphère-faisceau. Ces distributions sont données sur la figure 66 pour environ 4 millions de photons déterministes dans chaque cas.

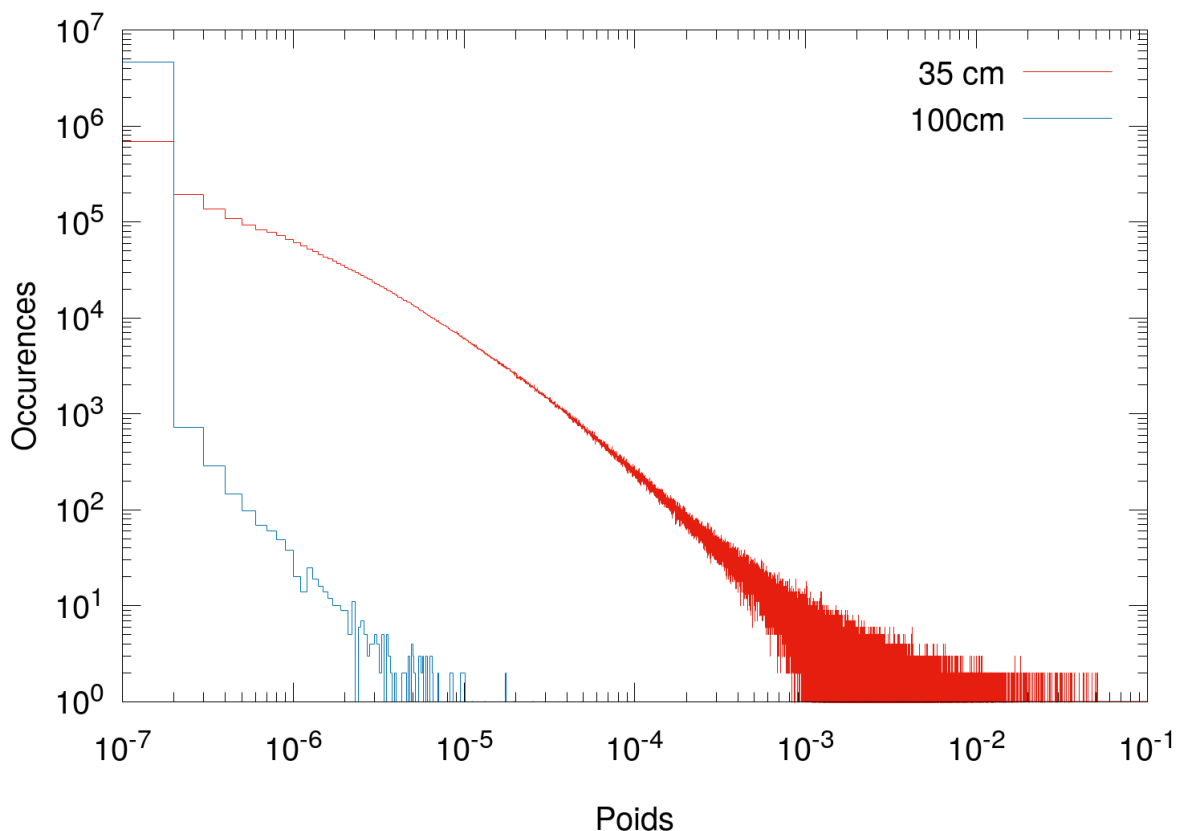


FIGURE 66 – Distribution entre 10^{-7} et 10^{-1} des poids entrants dans la sphère dans la configuration de test décrite en 7.2.2, pour une sphère de 5 cm de rayon placée à 35 cm et à 100 cm de l'axe d'un faisceau de photons de 100 keV (taille des bins : 10^{-7}).

On constate effectivement une importante différence dans la forme des distributions de poids obtenues : dans le cas où la sphère est placée à plus grande distance du faisceau, les particules de poids très faible semblent représenter une proportion plus grande de l'ensemble des photons déterministes arrivant à la sphère. Plus précisément, lorsque la sphère est placée à 35 cm du faisceau, 4,4 % des photons déterministes portent un poids supérieur au poids moyen

des photons entrant dans la sphère. Ce chiffre tombe à 0,48 % lorsque la sphère est placée à 100 cm, indiquant une plus forte proportion de particules de poids négligeables, et donc un besoin plus important de trier les photons via la roulette russe.

Bien que ce dernier exemple utilise une sphère placée à 100 cm du faisceau pour illustrer l'effet de la distance, le rapport d'efficacité moyen obtenu pour 100 cm est tout de même inférieur à celui obtenu pour 70 cm. On peut penser que, dans le cas étudié ici, les particules déterministes créées ne sont pas suivies très longtemps après avoir traversé la sphère, car elles n'ont qu'une faible distance à traverser avant de sortir de la cuve et donc de la géométrie de calcul. Leur suivi ne représente alors qu'une perte de temps modérée, limitant l'impact de la roulette russe. Par ailleurs, lors de l'étude de la version minimale du transport pseudo-déterministe, les rapports d'efficacité les plus élevés correspondaient justement aux sphères placées à 100 cm du faisceau (tableau 2), pour lesquelles la perte de temps suscitée par les nombreux photons déterministes créés pourrait être limitée par leur sortie rapide de la cuve à eau.

Cette nouvelle hypothèse est testée en réalisant à nouveau la série de simulations après avoir rallongé la cuve à eau de chaque côté, qui mesure alors 400 cm au lieu de 140 cm (on a alors 245 cm entre l'axe du faisceau et la bord droit de la cuve). Dans ce cas, l'augmentation moyenne d'efficacité induite par la roulette (utilisée ici seulement à l'entrée de la sphère et sans splitting) par rapport à la version minimale du code est respectivement de 7,7, 13,3 et 14,7 pour les sphères placées à 35 cm, 70 cm et 100 cm. On observe cette fois une augmentation du gain d'efficacité entre 70 cm et 100 cm, ce qui semble confirmer que la sortie rapide des particules dans la première configuration était responsable de la diminution de l'apport de la roulette russe.

L'augmentation d'efficacité est également plus importante lorsque les électrons ne sont pas suivis, ce qui compense la perte importante d'efficacité observée dans ce même cas avec la version minimale (en 7.2.3). Puisque les électrons sont ici des particules secondaires issues des interactions des photons, la proportion de photons éliminés par la roulette russe devrait être en moyenne égale à la proportion d'électrons qui ne seront pas créés (on peut voir les électrons comme une extension des histoires des photons). Le gain d'efficacité ne devrait donc pas varier avec la durée de suivi des électrons, à moins que le temps de suivi d'un électron créé par un photon déterministe soit en moyenne différent de celui d'un électron produit par un photon analogue. Cette différence pourrait être liée à la déviation importante subie par les photons déterministes lors de leur émission. Celle-ci étant généralement associée à une perte d'énergie élevée, les électrons créés par la suite de l'histoire d'un photon déterministe ont une énergie souvent faible et sont absorbés rapidement. Ainsi, lorsque l'énergie d'absorption des électrons est configurée par défaut, les histoires éliminées par la roulette représentent une proportion du temps de calcul total plus faible que dans le cas où les électrons ne sont pas suivis, rendant la roulette moins avantageuse.

Enfin, l'efficacité est davantage améliorée pour les petites sphères que pour les grandes. Ce résultat va dans le sens attendu pour le splitting : plus le libre parcours moyen d'un photon est élevé devant la taille de la sphère, plus il semble utile de multiplier le nombre de particules à l'entrée de la sphère pour augmenter la probabilité d'un dépôt d'énergie. Pour cette même raison, il est possible que le splitting contribue de manière importante à la différence observée sur l'amélioration d'efficacité entre les énergies faibles et les énergies élevées, pour lesquelles le libre parcours moyen des photons est plus important.

Afin de vérifier cette hypothèse, la simulation à 6 MeV dans la configuration décrite en 7.2.2, avec une sphère de rayon 5 cm placée à 70 cm du faisceau, a été réalisée en simulation analogue, avec la version minimale du transport pseudo-déterministe puis avec uniquement le splitting. Ces deux simulations ont ensuite été réalisées en remplaçant la sphère d'eau par une sphère de plomb, dans laquelle le libre parcours moyen des photons est inférieur à son rayon. Les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 4 ci-après.

TABLE 4 – Rapports d'efficacité obtenus en comparant la simulation utilisant le transport pseudo-déterministe à la simulation analogue, pour une énergie source de 6 MeV, et une sphère de rayon 5 cm placée à 70 cm du faisceau dans la configuration décrite en 7.2.2. La sphère dans laquelle la dose est estimée peut être remplie d'eau ou de plomb, et le transport pseudo-déterministe utilise soit le splitting seul, soit sa version minimale.

Matériau	Libre parcours à 6 MeV	R (Sans splitting)	R (Avec splitting)
Eau	~39 cm	5.3	11.7
Plomb	~2 cm	3.7	3.4

On constate que, dans le cas où la sphère est composée d'eau, l'utilisation du splitting multiplie environ par deux le gain d'efficacité. En revanche, lorsque la sphère est en plomb, l'utilisation du splitting ne modifie que très peu l'efficacité. Elle est même, dans ce cas, légèrement moins importante que lorsque le splitting n'est pas utilisé. Ce résultat vient donc appuyer l'idée que le splitting améliore davantage la variance lorsque le libre parcours des photons est élevé devant la taille de la sphère.

Ajout des roulettes aux interfaces

Le code utilisé pour cette série de simulations applique la roulette russe uniquement aux interfaces rencontrées durant le transport de la particule déterministe, tel que décrit en 6.3.4. L'efficacité est comparée au cas sans réduction de variance auxiliaire dans le tableau 5, pour la série de simulations décrite en 7.2.2.

TABLE 5 – Résultats obtenus en comparant la simulation avec roulette aux interfaces par rapport à la méthode minimale.

Paramètre	Valeur	R moyen	R médian
Énergie de la source	6 MeV	2.9	1.1
	1 MeV	1.1	1.1
	100 keV	1.5	1.2
Distance au faisceau	35 cm	1.2	1.2
	70 cm	3.3	1.2
	100 cm	1.0	1.0
Électrons suivis	oui	1.5	1.1
	non	2.2	1.1
Rayon de la sphère	1 cm	2.4	0.7
	5 cm	1.6	1.1
	10 cm	1.5	1.2
Moyenne/médiane globale		1.8	1.1

Si elle existe ici, l'amélioration d'efficacité est très légère, ce qui rend difficile l'observation de tendances avec la variation des paramètres. Le rapport d'efficacité est supérieur à 1 dans 33 cas sur 54, avec une moyenne de 1,8 et une médiane de 1,1. Les rapports d'efficacité sont bien moins importants que ceux constatés dans le cas précédent où la roulette et le splitting sont appliqués en entrée de la sphère, malgré une application plus tôt dans le transport des photons déterministes, qui devrait permettre une économie de temps plus importante pour chaque particule éliminée. Cette différence peut s'expliquer par plusieurs facteurs :

- L'absence du splitting en entrée et de la roulette en sortie.
- Une proportion plus faible de particules éliminées (la seule interface étant placée tôt sur le trajet des particules déterministes, leur poids est encore relativement élevé lorsqu'elles la traversent).
- Certaines particules déterministes ne rencontrent pas d'interface avant d'atteindre la sphère.
- Le temps de calcul intrinsèque à la roulette aux interfaces, qui nécessite plus d'opérations (notamment l'exponentielle d'atténuation), est plus important que celui nécessaire à la roulette appliquée à l'arrivée des photons.

Un meilleur résultat pourrait éventuellement être obtenu dans des configurations comprenant de nombreuses interfaces, pour lesquelles le suivi d'une particule jusqu'à la sphère est plus coûteux en temps, ou bien simplement dans des configurations où la majorité des photons déterministes rencontrent une interface dans leur transport.

Utilisation des roulettes après l'échantillonnage de l'angle de diffusion

La roulette russe est ici appliquée uniquement après l'échantillonnage de l'angle de diffusion, selon le poids de la particule déterministe avant son transport jusqu'à la sphère, suivant l'implémentation décrite en section 6.3.4. L'efficacité est comparée au cas sans réduction de variance auxiliaire dans le tableau 6, pour la série de simulations décrite en 7.2.2.

TABLE 6 – Résultats obtenus en comparant la simulation avec roulette appliquée après l'échantillonnage de l'angle de diffusion par rapport à la méthode minimale.

Paramètre	Valeur	R moyen	R médian
Énergie de la source	6 MeV	7.2	4.6
	1 MeV	5.6	1.4
	100 keV	3.5	2.6
Distance au faisceau	35 cm	3.4	2.1
	70 cm	9.3	6.0
	100 cm	3.6	1.8
Électrons suivis	oui	3.3	1.1
	non	7.5	6.0
Rayon de la sphère	1 cm	2.9	1.1
	5 cm	8.2	4.8
	10 cm	8.2	2.7
Moyenne/médiane globale		5.4	2.4

L'efficacité est ici améliorée dans 39 cas sur 54, avec une amélioration moyenne d'un facteur 5,4 et une médiane de 2,4. Nous avons vu dans la section 6.3.4 que le poids à partir duquel la roulette russe est appliquée après l'échantillonnage de la direction est une fraction du poids moyen entrant dans la sphère au cours d'une histoire. On peut donc s'attendre à ce que le poids du photon après l'échantillonnage de l'angle de diffusion soit généralement élevé par rapport au seuil, puisque l'atténuation liée au transport jusqu'à la sphère n'a pas encore été prise en compte, et donc à ce que la roulette ne soit pas utilisée fréquemment. On observe tout de même une amélioration globale, qui pourrait s'expliquer à la fois par une proportion en réalité non négligeable de particules éliminées avant leur transport déterministe, et par le fait que la roulette intervient plus tôt, permettant un gain de temps plus important pour chaque photon éliminé.

De même que pour la roulette utilisée à l'entrée de la sphère, l'efficacité augmente avec l'énergie des photons émis par la source. Ce résultat peut à nouveau être lié au suivi plus long des photons de plus haute énergie qui, lorsqu'ils sont éliminés par la roulette, permettent d'économiser davantage de temps de calcul.

La même observation que pour la roulette appliquée à l'entrée de la sphère peut également être faite concernant la distance au faisceau : l'augmentation d'efficacité est plus importante à 70 cm qu'à 35 cm, mais diminue à 100 cm. Dans ce cas aussi, cette dernière diminution peut être due à la proximité du bord de la cuve à eau.

À nouveau, l'augmentation d'efficacité est plus élevée lorsque les électrons ne sont pas suivis. Il est possible que ce résultat s'explique également par une différence de temps de suivi entre les électrons analogues et ceux créés par les photons déterministes, de même que dans le cas de la roulette à l'entrée de la sphère.

Enfin, l'efficacité est moins améliorée lorsque le rayon de la sphère est petit. Puisqu'aucun splitting n'est appliqué ici, aucune augmentation n'est attendue. Toutefois, une diminution pour les petites sphères est étonnante, et semble suggérer qu'il pourrait être préférable d'utiliser la roulette russe moins fréquemment lorsque le libre parcours moyen des photons

est élevé par rapport à la taille de la sphère, de manière à ne pas trop réduire le nombre de particules susceptibles de déposer de l'énergie dans la sphère, déjà peu nombreuses.

Roulette russe et splitting basés sur la carte d'importance

Ce groupe de simulations utilise uniquement les roulettes russes et le splitting basés sur la carte d'importance, décrits en sections 6.4.2 et 6.4.3, en plus de la roulette en sortie de la sphère destinée à éliminer une partie des particules supplémentaires créées par le splitting. Pour isoler l'effet de la carte d'importance, l'efficacité est comparée au cas où seule la roulette en sortie de la sphère est appliquée. Les résultats sont donnés dans le tableau 7 pour la série de simulations décrite en 7.2.2.

TABLE 7 – Résultats obtenus en comparant la simulation avec roulette et splitting basés sur la carte d'importance et roulette en sortie de la sphère, par rapport à l'application de la roulette en sortie seule.

Paramètre	Valeur	R moyen	R médian
Énergie de la source	6 MeV	3.0	1.9
	1 MeV	4.4	2.4
	100 keV	4.6	2.6
Distance au faisceau	35 cm	6.2	3.8
	70 cm	2.4	2.2
	100 cm	3.3	1.4
Électrons suivis	oui	2.2	1.6
	non	5.8	3.3
Rayon de la sphère	1 cm	4.0	2.4
	5 cm	4.4	2.3
	10 cm	3.4	2.1
Moyenne/médiane globale		4.0	2.2

Bien que l'augmentation d'efficacité soit relativement modeste dans ce cas par rapport à la complexité de la méthode, l'utilisation de la carte d'importance permet un gain dans 42 cas sur les 54 testés (en moyenne d'un facteur 4, avec un gain médian de 2,2). Ce résultat est toutefois très dépendant des réglages choisis pour la carte : la taille et le nombre des voxels, ainsi que le nombre d'histoires utilisées pour son estimation peuvent grandement influencer l'efficacité, et leur optimisation pourrait permettre une amélioration plus importante. De plus, elle ne prend en compte ici que la position des particules, et permet donc tout de même la création de particules de poids négligeables qui seront transportées jusqu'à la sphère (par exemple pour les photons d'énergie très faible mais proches de la sphère). Bien que plus difficile à paramétrer et plus longue à calculer, une carte prenant en compte la direction et l'énergie pourrait être encore plus efficace. Enfin, la carte étant calculée indépendamment par chaque processeur dans l'implémentation actuelle, il est probable que son effet soit largement atténué par rapport à ce qu'elle apporterait en étant calculée avec l'ensemble des processeurs.

On observe que le rapport d'efficacité augmente lorsque l'énergie diminue. Il est possible que, dans les cas où l'énergie de la source est élevée, la probabilité d'atteindre la sphère

dépende peu de la position des photons (leur libre parcours étant plus élevé). Puisque la carte d'importance prend en compte uniquement la position des particules, son impact pourrait alors être moins important dans ce cas.

Le gain apporté par la technique semble également diminuer à mesure que la sphère s'éloigne. Cette baisse pourrait s'expliquer par une plus grande homogénéité de la carte d'importance à proximité du faisceau lorsque la sphère en est éloignée, notamment liée aux angles de diffusion qui sont alors très similaires pour tous les photons déterministes par simple effet géométrique. La carte influencerait alors moins la création des particules déterministes.

Enfin, à nouveau, le gain d'efficacité est plus élevé lorsque les électrons ne sont pas suivis. En revanche, cette fois-ci, la taille de la sphère ne semble pas avoir une influence importante malgré la présence d'un splitting.

Application de l'ensemble des techniques précédentes

L'ensemble des techniques liées aux roulettes et aux splittings sont ici appliquées en même temps. L'efficacité est comparée à la méthode sans techniques auxiliaires et les résultats sont donnés dans le tableau 8 pour la série de simulations décrite en 7.2.2.

TABLE 8 – Résultats obtenus en comparant la simulation avec l'ensemble des roulettes et splittings, par rapport à la méthode minimale.

Paramètre	Valeur	<i>R</i> moyen	<i>R</i> médian
Énergie de la source	6 MeV	1114.7	46.0
	1 MeV	1419.8	140.3
	100 keV	77.0	44.7
Distance au faisceau	35 cm	825.5	74.8
	70 cm	1567.9	65.6
	100 cm	218.2	19.6
Électrons suivis	oui	202.3	23.8
	non	1538.6	110.4
Rayon de la sphère	1 cm	2454.3	177.6
	5 cm	106.5	88.7
	10 cm	50.7	38.4
Moyenne/médiane globale		570.5	47.8

Les roulettes russes et les splittings permettent, dans ce cas, une amélioration moyenne de l'efficacité d'un facteur 570,5, avec une médiane à 47,8. Bien qu'important, ce gain est très inégal selon les paramètres testés. En particulier, le rapport d'efficacité est maximum pour une énergie de 1 MeV, mais reste faible pour les simulations à 100 keV. Cet écart est difficile à interpréter, en raison des multiples effets concurrents (modification des libres parcours moyens et des type d'interactions subies par les photons, avec notamment la création de paires apparaissant pour les simulations à 6 MeV) qui peuvent avoir une influence sur l'efficacité, en plus de la présence simultanée de plusieurs techniques supplémentaires. La diminution importante observée à 100 keV est très probablement liée au résultat obtenu pour la roulette

et le splitting à l'entrée de la sphère, pour lesquels le gain d'efficacité est plus faible à basse énergie.

On retrouve également la diminution observée pour les sphères placées à 100 cm du faisceau, pour lesquelles le gain de temps apporté par les roulettes est plus modéré lorsque la sphère est proche du bord de la cuve, les photons n'ayant que peu de chemin à parcourir pour en sortir.

Encore une fois, on observe un gain largement plus important lorsque les électrons ne sont pas suivis. L'origine de cette différence devrait être la même que pour celle observée pour chaque technique de manière indépendante.

Enfin, on constate encore une très forte variation du rapport d'efficacité avec le rayon de la sphère, avec un gain bien plus important pour les rayons les plus faibles. Cette différence peut être reliée au résultat obtenu pour les roulettes et les splittings opérés après la création de la particule, qui montrait la même évolution avec le rayon de la sphère.

Malgré des résultats très hétérogènes, cette série de simulations met clairement en évidence l'importance des roulettes russes et des splittings sur le gain d'efficacité apporté par le transport pseudo-déterministe qui, lorsqu'il est utilisé seul, diminue l'efficacité dans la plupart des cas étudiés ici.

7.2.5 Application aux différentes interactions produisant des photons

La série de simulations réalisée permet de constater de manière claire l'effet des roulettes russes et des splittings. En revanche, l'application du transport pseudo-déterministe à d'autres interactions est plus difficile à mettre en évidence sans modifier la configuration simulée. Dans les cas étudiés, ces interactions sont parfois rares et l'effet de l'application du transport pseudo-déterministe lors de leur survenue n'est pas toujours visible : pour l'application du transport pseudo-déterministe à chaque nouvelle interaction, quel que soit le paramètre étudié, les rapports moyens et médians sont tous très proches de 1.

Un effet se manifeste toutefois pour l'application du transport pseudo-déterministe à l'annihilation électron-positon. Le résultat de cette série de simulations est présenté ci-dessous.

Application à l'annihilation

Décrite en section 6.5.2, cette utilisation partielle du transport pseudo-déterministe consiste à transporter de manière déterministe les photons issus d'annihilation qui sont dirigés vers la sphère lors de leur création. Ce cas est comparé ci-dessous, dans le tableau 9, au cas où le transport pseudo-déterministe est appliqué seulement aux diffusions pour la série de simulations décrite en 7.2.2. L'ensemble des roulettes et splittings sont appliqués dans les deux cas.

TABLE 9 – Résultats obtenus en comparant la simulation appliquant partiellement le transport pseudo-déterministe aux photons issus d’annihilation, par rapport à la méthode appliquée seulement aux diffusions.

Paramètre	Valeur	R moyen	R médian
Énergie de la source	6 MeV	4.1	1.8
	1 MeV	1.3	1.0
	100 keV	1.7	1.0
Distance au faisceau	35 cm	1.7	1.1
	70 cm	3.0	1.1
	100 cm	2.5	0.9
Électrons suivis	oui	3.3	1.1
	non	1.5	1.0
Rayon de la sphère	1 cm	3.1	1.0
	5 cm	2.6	1.1
	10 cm	1.4	1.1
Moyenne/médiane globale		2.4	1.1

L’efficacité est améliorée ici dans 30 cas sur 54, mais les augmentations les plus importantes correspondent naturellement aux simulations à 6 MeV pour lesquelles l’annihilation est présente. Cet effet est surtout visible sur les rapports médians, dont seul celui associé aux simulations à 6 MeV est très différent de 1.

Afin de s’assurer de l’effet de la technique, une des simulations décrites en 7.2.2 est réalisée à nouveau sur une durée plus importante. Celle-ci correspond au cas où l’énergie de la source est de 6 MeV, où une sphère de 1 cm de rayon est placée à 70 cm du faisceau, et où l’énergie d’absorption des électrons est configurée par défaut. Cette simulation est alors réalisée sur une durée de 10 heures sur 160 processeurs pour :

- Un calcul analogue,
- Un calcul utilisant le transport pseudo-déterministe sans application à l’annihilation,
- Un calcul utilisant le transport pseudo-déterministe appliqué également à l’annihilation.

Dans les deux derniers cas, l’ensemble des roulettes et des splittings sont utilisés. Les résultats obtenus pour l’estimation de la dose dans la sphère d’eau sont donnés ci-après dans le tableau 10.

TABLE 10 – Efficacité de l'estimation de la dose pour la configuration décrite en 7.2.2, pour une énergie source de 6 MeV, une sphère de rayon 1 cm placée à 70 cm du faisceau, et un suivi par défaut des électrons, pour le calcul analogue puis avec le transport pseudo-déterministe appliqué ou non à l'annihilation électron-positon.

Simulation	Efficacité
Analogue	4.1×10^{-5}
Transport pseudo-déterministe	3.2×10^{-4}
Transport pseudo-déterministe + annihilation	2.3×10^{-3}

L'utilisation du transport pseudo-déterministe permet de gagner un facteur 7,8 sur l'efficacité par rapport à la simulation analogue. Son application aux photons issus d'annihilation permet, quant à elle, de multiplier l'efficacité par 56 par rapport au calcul analogue, ce qui représente une augmentation d'un facteur 7,2 par rapport au transport pseudo-déterministe utilisé seul. L'effet est donc bien marqué lorsque l'énergie de la source de photons est suffisante pour que des positons soient présents dans la simulation, et pourrait l'être encore davantage à des énergies plus élevées. De plus, dans l'implémentation actuelle, le transport pseudo-déterministe n'est appliqué à l'annihilation que pour amener une particule à la sphère lorsque sa direction est déjà favorable. Le gain d'efficacité pourrait être plus intéressant si la méthode était appliquée entièrement, en échantillonnant également la direction d'émission du photon de manière conditionnelle.

L'application du transport pseudo-déterministe aux autres interactions produisant des photons n'est pas mise en évidence par la série de simulations utilisée jusqu'alors. Pour chaque interaction, une configuration spécifique, dédiée à souligner l'effet du transport pseudo-déterministe, est élaborée et présentée ci-après avec les résultats obtenus.

Test de l'application au bremsstrahlung

La conséquence de l'application partielle du transport pseudo-déterministe au rayonnement de freinage des électrons, telle que décrite en 6.5.2, est mise en évidence à l'aide de la configuration représentée sur la figure 67.

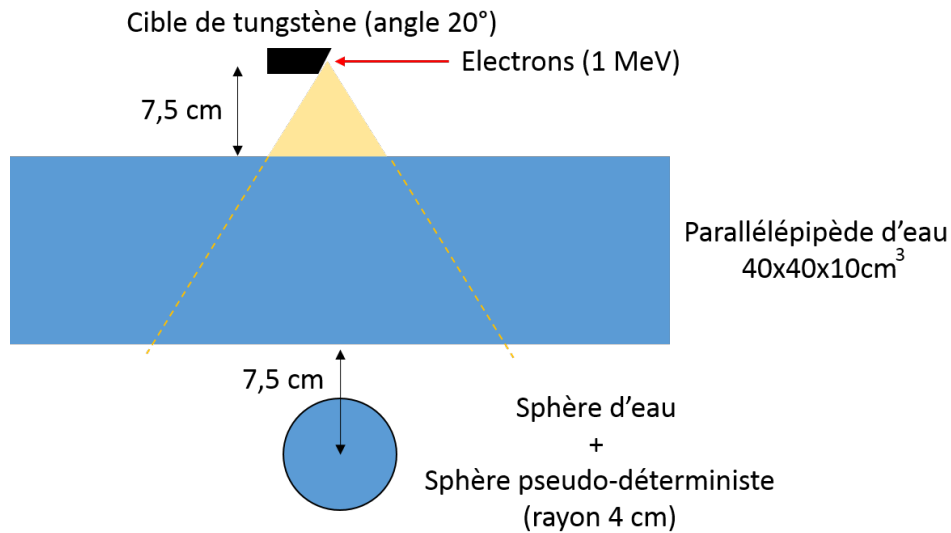


FIGURE 67 – Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur l'émission de photons par bremsstrahlung.

Des électrons d'énergie 1 MeV interagissent sur une cible de tungstène d'angle 20° pour créer des photons par rayonnement de freinage. Une cuve à eau de dimensions 40×40×10 cm³ est placée à 7,5 cm sous le centre de la cible. Cette dernière atténue le faisceau de photons, qui atteint ensuite une sphère d'eau de rayon 4 cm, confondue avec une sphère pseudo-déterministe sans rayon interne, et dont le centre est placé à 7,5 cm de la face inférieure de la cuve. Le calcul est réalisé au cours de 10 heures sur 160 processeurs dans les cas suivants :

- Simulation analogue,
- Transport pseudo-déterministe sans application au rayonnement de freinage,
- Transport pseudo-déterministe appliqué également au rayonnement de freinage.

L'ensemble des roulettes russes et des splittings sont utilisés dans tous les cas. Les efficacités obtenues pour ce calcul sont présentées dans le tableau 11.

TABLE 11 – Efficacité de l'estimation de la dose pour la configuration de la figure 67 pour le calcul analogue, puis avec le transport pseudo-déterministe appliqué ou non à l'émission de photons par bremsstrahlung.

Simulation	Efficacité
Analogue	6.2×10^{-3}
Transport pseudo-déterministe	9.2×10^{-3}
Transport pseudo-déterministe + bremsstrahlung	4.7×10^{-2}

Le transport pseudo-déterministe permet ici un gain modeste d'un facteur 1,5 qui pourrait s'expliquer par la position de la sphère : elle peut en effet être directement atteinte par des photons émis dans sa direction et traversant la cuve, ce qui limite l'intérêt de la réduction de variance. De plus, il s'agit d'une source d'électrons et non de photons, et ceux-ci occupent un temps de simulation important.

L'utilisation partielle du transport pseudo-déterministe sur les photons issus de bremsstrahlung permet en revanche un gain d'un facteur 5 sur l'efficacité, pour un gain total d'un facteur 7,5 par rapport au cas analogue. Cet exemple permet de mettre en évidence un apport non négligeable de cette application supplémentaire de la technique lorsque le rayonnement de freinage est à l'origine de nombreux photons dirigés vers la région où la dose est estimée.

Test de l'application à la fluorescence

L'application complète du transport pseudo-déterministe à l'émission de photons par fluorescence, telle que décrite en 6.5.1, est testée grâce à la configuration illustrée sur la figure 68 ci-après.

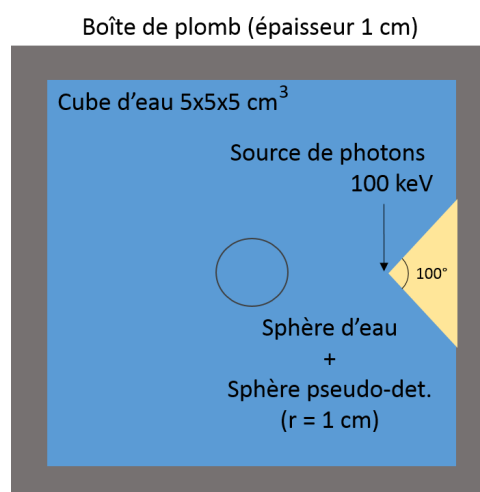


FIGURE 68 – Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur l'émission de photons par fluorescence (les dimensions ne sont pas à l'échelle).

Une sphère d'eau de rayon 1 cm est placée au centre d'un cube d'eau de dimensions $5 \times 5 \times 5 \text{ cm}^3$, lui-même placé à l'intérieur d'une boîte de plomb cubique d'épaisseur 1 cm. Une source conique de photons de 100 keV, de demi-angle d'ouverture 50° , est placée dans l'eau à 1 mm du centre de la paroi droite du cube et émet en direction de la boîte de plomb. Une sphère pseudo-déterministe de rayon interne 1 cm (rayon externe 1,5 cm) est superposée à la sphère d'eau, dans laquelle la dose est estimée au cours d'une simulation de 10 heures sur 160 processeurs. Cette configuration est conçue pour obtenir une proportion d'interactions photoélectriques suffisamment grande dans le plomb pour que de nombreux photons de fluorescence soient émis, tout en diminuant leur probabilité d'atteindre la sphère grâce à l'eau placée à l'intérieur de la boîte.

Les efficacités obtenues pour cette simulation sont présentées dans le tableau 12 pour le cas analogue, le transport pseudo-déterministe, et le transport pseudo-déterministe appliqué également à la fluorescence. Les roulettes russes et les splittings sont à nouveau utilisés dans chaque cas.

TABLE 12 – Efficacité de l'estimation de la dose pour la configuration de la figure 68 pour le calcul analogue, puis pour le transport pseudo-déterministe appliqué ou non à l'émission de photons par fluorescence.

Simulation	Efficacité
Analogue	2.2×10^{-2}
Transport pseudo-déterministe	5.0×10^{-2}
Transport pseudo-déterministe + fluorescence	1.8

Dans cette configuration, l'application du transport pseudo-déterministe permet seulement un gain d'un facteur 2,3 sur l'efficacité par rapport à la simulation analogue. Ce gain pourrait s'expliquer par le fait que les photons diffusés dans l'eau doivent être fortement déviés par le transport pseudo-déterministe pour atteindre la sphère et voient ainsi leur poids réduit de manière importante. En revanche, puisque la source de photons est très proche de la paroi, une grande proportion de photons est absorbée par effet photoélectrique dans le plomb. Ces interactions donnent naissance à des photons de fluorescence auxquels le transport pseudo-déterministe ne s'applique pas. Ces derniers peuvent entrer dans la sphère et causer des fluctuations de poids.

En revanche, appliquer la méthode aux photons issus de fluorescence multiplie l'efficacité par 36 par rapport à ce dernier cas, pour une amélioration totale d'un facteur supérieur à 80 par rapport à la simulation analogue. Son utilisation pour les photons de fluorescence est donc ici essentielle pour accélérer le calcul.

Test de l'application à l'effet photoélectrique

La configuration représentée sur la figure 69 ci-après est utilisée pour évaluer l'influence de l'ajout du transport pseudo-déterministe partiel aux photons survivant à une interaction photoélectrique telle que décrite en 6.5.3¹³.

13. Pour rappel : pour des raisons d'échantillonnage, il est possible dans PENELOPE et Phoebe qu'un photon survive à une interaction photoélectrique. Aucune interaction n'a réellement lieu dans ce cas et le photon continue son chemin sans perte d'énergie ou déviation.

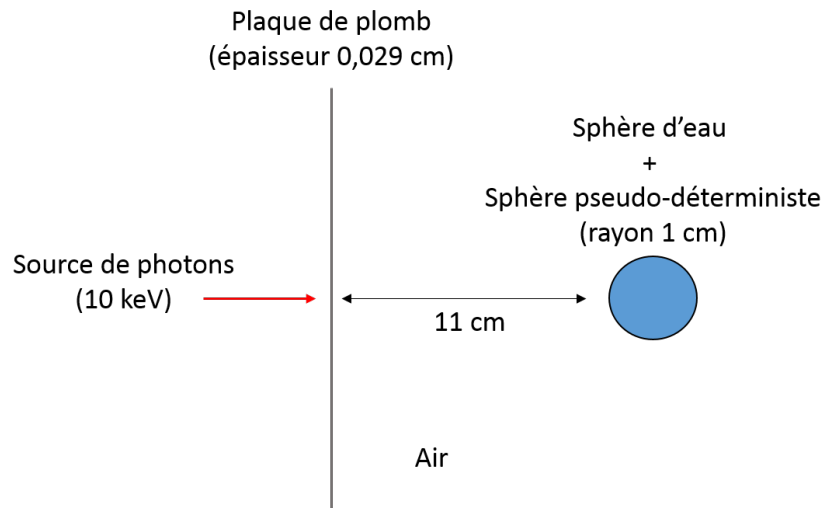


FIGURE 69 – Schéma de la configuration utilisée pour le test de l'application du transport pseudo-déterministe sur les photons survivant à un effet photoélectrique.

Des photons d'énergie 10 keV sont émis par une source unidirectionnelle vers le centre d'une plaque de plomb d'épaisseur 0,029 cm, située à 11 cm d'une sphère d'eau de rayon 1 cm, à laquelle est superposée une sphère pseudo-déterministe de même rayon et sans sphère interne.

L'énergie est choisie pour que l'effet photoélectrique soit majoritaire dans le plomb : sa section efficace est ici environ 50 fois plus élevée que celle de la diffusion Rayleigh, elle-même très largement supérieure à celles des autres interactions. L'épaisseur de la plaque de plomb permet à environ 1 % des photons de la traverser sans interagir.

Les efficacités obtenues pour ces calculs sont présentées dans le tableau 13 pour la simulation analogue, la simulation utilisant le transport pseudo-déterministe, et la simulation utilisant le transport pseudo-déterministe appliqué également à l'effet photoélectrique.

TABLE 13 – Efficacité de l'estimation de la dose pour la configuration de la figure 69 pour le calcul analogue, puis pour le transport pseudo-déterministe appliqué ou non aux photons survivant à l'effet photoélectrique.

Simulation	Efficacité
Analogue	$3,863 \times 10^3$
Transport pseudo-déterministe	$1,449 \times 10^3$
Transport pseudo-déterministe + photoélectrique	$1,448 \times 10^3$

Le transport pseudo-déterministe diminue l'efficacité dans les deux cas où il est utilisé. Ce résultat n'est pas surprenant compte tenu du fait que les photons sont déjà tous dirigés vers la sphère. Cette condition est tout de même nécessaire pour appliquer la technique après une interaction photoélectrique, puisque cette dernière ne modifie pas la direction du photon.

Dans cet exemple, l'application à l'effet photoélectrique ne modifie pas l'efficacité de l'estimation de la dose dans la sphère. Même si cette interaction est la plus probable dans ce cas de figure, il reste possible que les photons concernés par le transport pseudo-déterministe,

c'est-à-dire ceux qui survivent à l'effet photoélectrique, soient très minoritaires et ne présentent pas un intérêt suffisant.

Après examen de l'origine des photons déterministes créés, on constate en effet que le nombre de photons concernés est de l'ordre de quelques dizaines pour un million de photons déterministes. Ils ne sont donc pas assez nombreux pour faire une différence sur la rapidité du calcul, et l'application de la méthode à l'effet photoélectrique n'a pas de réel impact ici.

7.2.6 Version finale (toutes techniques appliquées)

Finalement, la version du transport pseudo-déterministe comprenant l'ensemble des techniques auxiliaires citées précédemment est comparée ci-dessous dans le tableau 14 à la version minimale pour l'ensemble de simulations décrit en 7.2.2. Le résultat obtenu avec toutes les roulettes russes et les splittings est rappelé dans la colonne *r+s*, de manière à pouvoir observer la contribution de l'application de la méthode aux autres interactions.

Comparaison à la version minimale

TABLE 14 – Résultats obtenus en comparant la simulation appliquant l'ensemble des techniques auxiliaires à la version minimale. La dernière colonne reprend les résultats obtenus avec seulement les roulettes et les splittings.

Paramètre	Valeur	<i>R</i> moyen	<i>R</i> médian	<i>R</i> médian (<i>r+s</i>)
Énergie de la source	6 MeV	8224.1	66.1	46.0
	1 MeV	1840.2	153.1	140.3
	100 keV	121.0	47.5	44.7
Distance au faisceau	35 cm	1910.7	82.7	74.8
	70 cm	7986.9	111.3	65.6
	100 cm	287.6	29.9	19.6
Électrons suivis	oui	268.2	31.2	23.8
	non	6521.9	147.2	110.4
Rayon de la sphère	1 cm	10001.2	459.5	177.6
	5 cm	128.1	107.1	88.7
	10 cm	55.8	34.3	38.4
Moyenne/médiane globale		3395.1	56.8	47.8

À l'exception d'un seul (le rapport médian pour les simulations avec une sphère de 10 cm de rayon), la totalité des rapports moyens et médians sont supérieurs à ceux obtenus dans le cas où seuls les roulettes et les splittings étaient appliqués. Toutefois, l'augmentation des rapports médians est relativement faible dans la plupart des cas, tandis que les moyennes peuvent être fortement augmentées. Cette différence semble indiquer la présence de cas plus extrêmes, pour lesquels l'efficacité est très fortement augmentée, lorsque le transport pseudo-déterministe est appliqué à toutes les interactions produisant des photons. Ce résultat semble cohérent, puisque l'application de la méthode à des interactions spécifiques n'a d'effet que

dans certaines configurations parmi celles utilisées, et modifie donc la moyenne des efficacités mais pas nécessairement la médiane.

Par rapport à la version minimale du transport pseudo-déterministe, les gains d'efficacité sont encore plus importants qu'en appliquant seulement les roulettes et les splittings, mettant encore en évidence l'importance des techniques complémentaires.

La variation du gain d'efficacité avec les paramètres de simulation est très similaire à celle constatée dans le cas où seuls les roulettes et le splitting sont appliqués. Ce résultat n'est pas surprenant, puisque l'application du transport pseudo-déterministe aux autres interactions n'a ici que peu d'influence par rapport aux roulettes et aux splittings, qui sont en grande partie à l'origine des variations observées.

Comparaison au résultat analogue

Les résultats obtenus pour la version finale de la méthode, comprenant toutes les techniques auxiliaires, sont comparés ci-dessous dans le tableau 15 aux résultats obtenus en simulation analogue pour la série de simulations décrite en 7.2.2.

TABLE 15 – Résultats obtenus en comparant la simulation appliquant l'ensemble des techniques auxiliaires à la simulation analogue. La dernière colonne rappelle les résultats obtenus avec la version minimale de la méthode.

Paramètre	Valeur	<i>R</i> moyen	<i>R</i> médian	<i>R</i> médian (minimale)
Énergie de la source	6 MeV	141.1	25.3	0.31
	1 MeV	126.4	23.1	0.17
	100 keV	28.9	11.0	0.29
Distance au faisceau	35 cm	97.4	14.9	0.13
	70 cm	130.7	17.6	0.17
	100 cm	70.6	21.1	0.50
Électrons suivis	oui	99.0	18.0	0.70
	non	101.1	15.4	0.09
Rayon de la sphère	1 cm	281.9	301.7	0.30
	5 cm	18.8	15.4	0.17
	10 cm	9.6	7.6	0.25
Moyenne/médiane globale		100.1	15.5	0.24

Par rapport à la simulation analogue, l'efficacité est augmentée dans l'ensemble des 54 cas étudiés ici, en moyenne d'un facteur 100,1 et avec un facteur médian de 15,5. Bien que le transport pseudo-déterministe seul diminuait l'efficacité dans la majorité des cas, l'introduction des techniques auxiliaires permet de compenser largement cette perte et d'obtenir une accélération importante du calcul pour la plupart d'entre eux.

À cause de la variation du gain d'efficacité apporté par les techniques auxiliaires suivant les paramètres de simulation, l'apport de la version finale du transport pseudo-déterministe est lui aussi très variable selon les cas. En particulier, la variation importante du gain d'efficacité introduit par les techniques auxiliaires avec le rayon de la sphère a un impact conséquent sur le gain d'efficacité apporté globalement par la méthode. Ainsi, l'accélération du calcul est

largement plus élevée pour les sphères de petite taille, avec un rapport d'efficacité médian de 301,7.

Précédemment, nous avons constaté que le transport pseudo-déterministe appliqué seul dégradait énormément l'efficacité lorsque les électrons n'étaient pas suivis (avec un rapport médian de 0,09). Ce cas a été très largement amélioré par l'introduction des techniques auxiliaires, et le choix de suivre ou non les électrons n'a ici presque plus d'importance (le rapport moyen est de 99,0 en suivant les électrons, contre 101,1 sinon ; les rapports médians respectifs sont de 18,0 et 15,4).

Enfin, le gain d'efficacité semble être plus faible à basse énergie. Ce résultat peut être lié à l'augmentation plus modérée de l'efficacité observée à 100 keV lors de l'ajout des roulettes russes et du splitting. La perte d'efficacité initiale n'est alors pas autant compensée que pour les autres cas, et l'apport de la méthode reste limité pour cette énergie.

On constate globalement que les accélérations présentées ici dépendent fortement des paramètres de la simulation et de la configuration étudiée. En vue d'obtenir une meilleure idée de la performance de cette version du transport pseudo-déterministe, en particulier pour les utilisateurs de MCNP familiers avec la méthode, la section suivante la compare à l'implémentation originale : le module DXTRAN du code MCNP.

7.3 Comparaison avec la méthode DXTRAN de MCNP

L'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe est basée en partie sur la description faite dans la documentation du code MCNP, dans lequel la méthode est disponible. Toutefois, les deux versions de la méthode présentent nécessairement des différences, issues à la fois des spécificités de chaque code, des choix d'implémentation, et des techniques complémentaires qui y sont éventuellement associées. Il est donc fortement probable que le gain d'efficacité soit différent d'un code à l'autre. Cette section vise donc à étudier brièvement l'apport du transport pseudo-déterministe dans les codes MCNP et Phoebe, pour une estimation de dose hors-champ dans une configuration simple.

7.3.1 Configuration simulée

La configuration utilisée pour cette comparaison est représentée ci-dessous sur la figure 70. Elle est identique pour les deux codes, à l'exception des paramètres de simulation spécifiques à Phoebe ou MCNP (par exemple les paramètres de calcul de la carte d'importance).

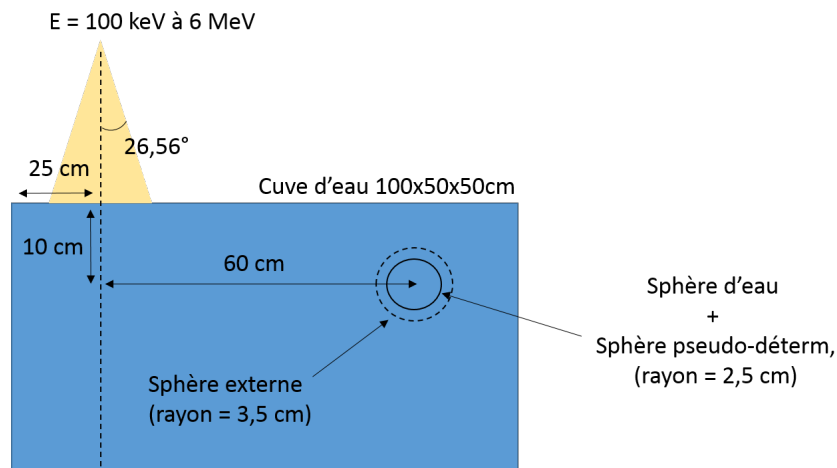


FIGURE 70 – Illustration de la configuration de test utilisée pour la comparaison du transport pseudo-déterministe dans MCNP et Phoebe.

Une cuve d'eau de dimensions $100 \times 50 \times 50 \text{ cm}^3$ est placée dans le vide et irradiée par un faisceau conique de photons, dont la source est placée à 10 cm au dessus de la cuve. L'axe du faisceau est situé à 25 cm de la face gauche de la cuve, et est centré par rapport à l'axe avant-arrière. Son demi-angle d'ouverture est fixé à $26,56^\circ$, de manière à ce que la largeur du faisceau soit de 10 cm à 10 cm de profondeur. La dose est estimée dans une sphère d'eau de rayon 2,5 cm placée dans la cuve à 10 cm de profondeur, située à distance égale des faces avant et arrière, et à 60 cm de l'axe du faisceau (soit 50 cm du bord de champ). Une sphère pseudo-déterministe de rayon interne 2,5 cm et de rayon externe 3,5 cm est superposée à cette dernière.

L'estimation de la dose est réalisée pour plusieurs faisceaux d'énergies comprises entre 100 keV et 10 MeV, de manière à observer l'effet du transport pseudo-déterministe dans les deux codes pour différentes gammes d'interactions des photons.

Dans le cas de Phoebe, le ratio Q entre les deux sphères vaut 5. La carte d'importance recouvre exactement la cuve, est constituée de $100 \times 50 \times 50$ voxels, et est calculée sur les 10^6 premiers photons déterministes. Pour MCNP, la méthode DXTRAN est configurée entièrement par défaut et seules la position et la taille des sphères sont données. Dans les deux cas, le calcul est réalisé sur 160 processeurs au cours d'environ une heure.

L'efficacité du calcul dans les deux codes n'est pas directement comparée. Il est très probable qu'en simulation analogue, dans des conditions exactement similaires, l'efficacité soit relativement proche dans les deux cas. Les deux codes étant toutefois ici configurés en grande partie par défaut, il reste possible que des paramètres de simulation diffèrent et influent sur la rapidité du calcul de manière non contrôlée. De plus, la comparaison des deux codes n'est pas l'objectif recherché ici. On s'intéresse, en revanche, à l'apport du transport pseudo-déterministe sur l'efficacité de l'estimation dans chaque code.

7.3.2 Résultats et commentaires

La figure 72 ci-après présente dans un premier temps l'estimation de l'énergie déposée dans la sphère pour une particule source, obtenue avec Phoebe et MCNP pour différentes énergies en simulation analogue.

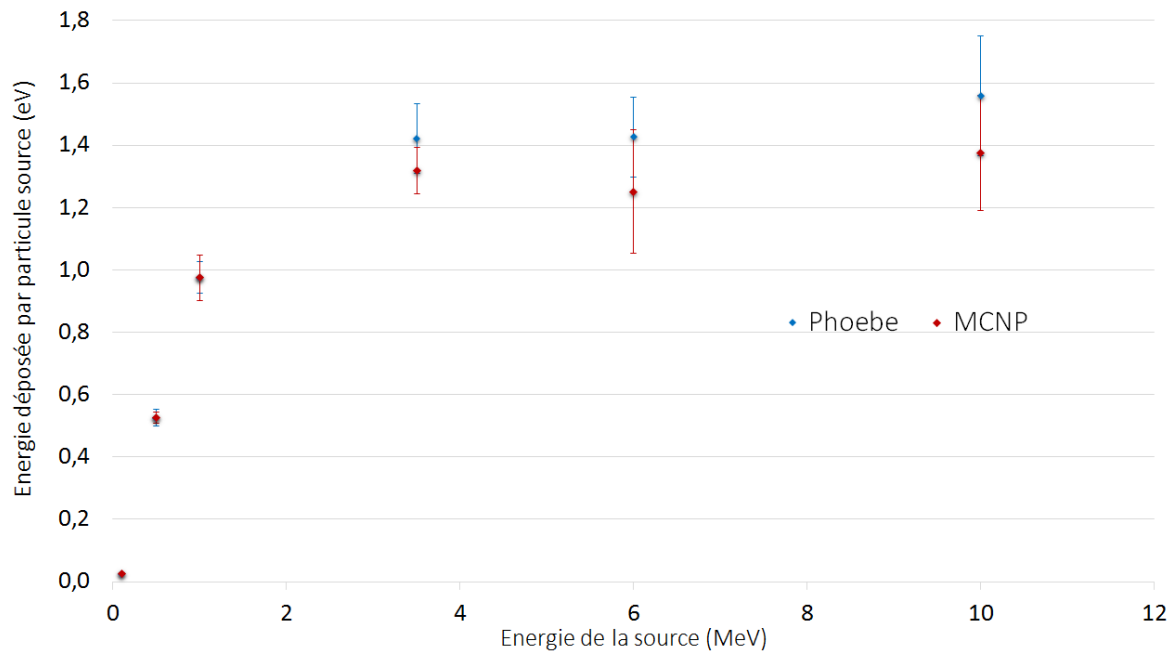


FIGURE 71 – Énergie déposée par particule source dans la sphère de la configuration de la figure 70 pour des énergies de 100 keV à 10 MeV, dans Phoebe et MCNP en simulation analogue.

Ce résultat permet d’observer une augmentation rapide de la dose déposée par particule source à mesure que l’énergie croît, puis la formation d’un plateau à plus haute énergie lorsque les photons traversent davantage la cuve sans interagir et diffusent préférentiellement vers l’avant. Pour les deux codes, l’incertitude relative sur l’estimation se situe entre 3 % et 16 %, avec un maximum à 6 MeV et 10 MeV. Compte tenu de cette incertitude, il est possible de considérer que les résultats sont compatibles bien que les valeurs tendent à s’écarter à plus haute énergie, avec une possible surestimation de Phoebe par rapport à MCNP (ou inversement).

La figure 72 ci-dessous donne les résultats obtenus pour les mêmes estimations, en utilisant cette fois-ci le transport pseudo-déterministe.

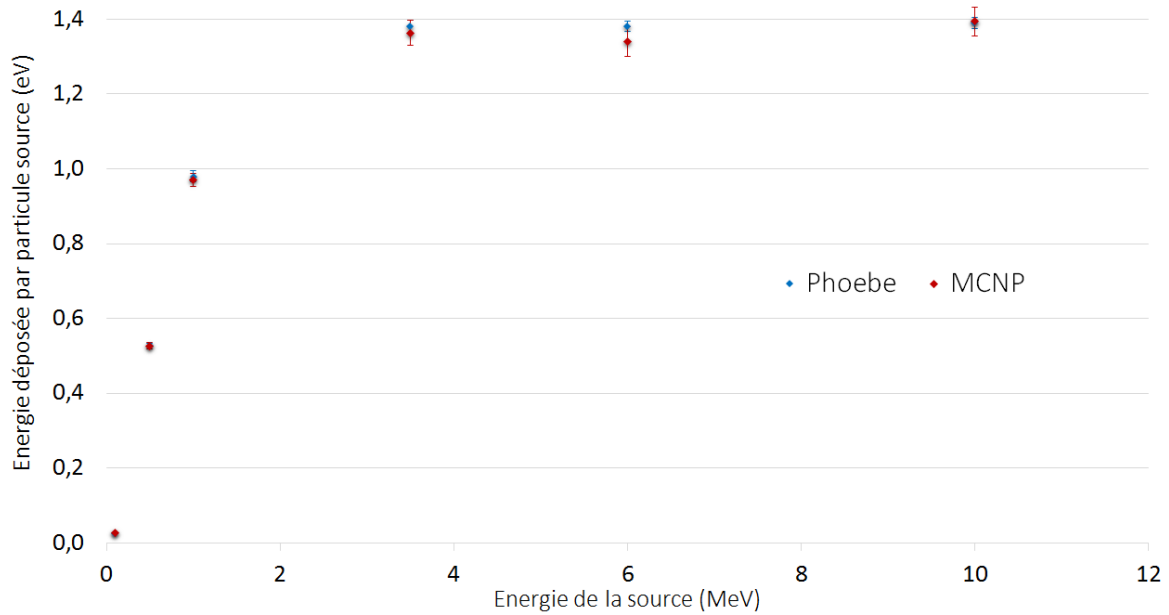


FIGURE 72 – Énergie déposée par particule source dans la sphère de la configuration de la figure 70 pour des énergies de 100 keV à 10 MeV, en utilisant le transport pseudo-déterministe dans Phoebe et MCNP.

Chaque estimation, quelle que soit l'énergie de la source, donne un résultat très proche pour les deux codes et les valeurs peuvent être considérées comme compatibles compte tenu de l'incertitude, maintenant comprise entre 0,8 % et 2,3 % pour Phoebe et 1,7 % et 4,4 % pour MCNP. Aucune tendance significative ne peut s'observer sur l'écart entre les deux codes, ce qui indique que la différence observée sur la figure 71 serait uniquement due à l'incertitude statistique.

Enfin, ci-dessous, la figure 73 donne le gain d'efficacité apporté par le transport pseudo-déterministe pour l'ensemble des estimations précédentes.

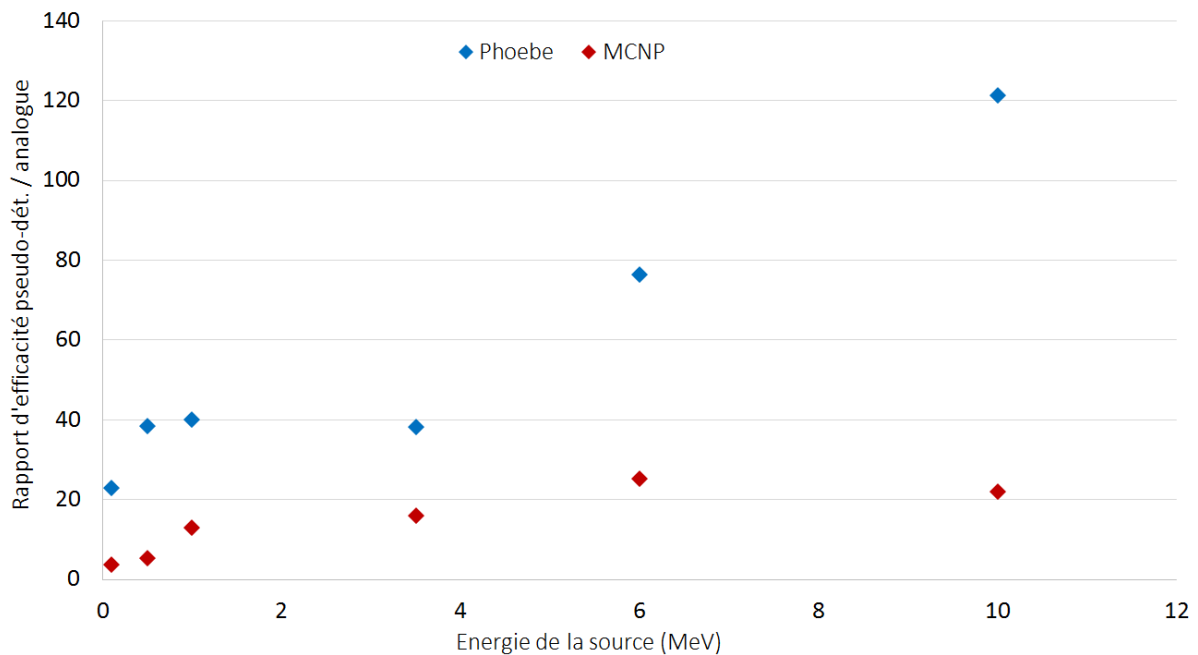


FIGURE 73 – Gain d’efficacité apporté par l’usage du transport pseudo-déterministe et DXTRAN, respectivement pour Phoebe et MCNP, pour les estimations réalisées dans la configuration de la figure 70 entre 100 keV et 10 MeV.

De manière générale, le transport pseudo-déterministe tel qu’utilisé ici dans Phoebe apporte un gain d’efficacité supérieur à la configuration par défaut de DXTRAN dans MCNP. Chaque simulation a par ailleurs été répétée avec une nouvelle *seed* pour s’assurer davantage de la stabilité du résultat, et les rapports d’efficacité ne diffèrent que très peu entre les deux essais.

Entre 100 keV et 1 MeV, le gain d’efficacité varie entre 4 et 13 pour MCNP contre 22 à 40 pour Phoebe. Il s’agit des énergies pour lesquelles l’écart entre les deux gains est le plus important. Cette différence peut avoir de nombreuses origines, et il pourrait être intéressant d’étudier à nouveau l’influence de chaque technique auxiliaire sur le résultat.

À plus haute énergie, de 2 MeV à 10 MeV, le gain en efficacité est plus important pour les deux codes. En revanche, l’écart entre les deux réductions de variance est légèrement moindre. L’écart entre Phoebe et MCNP tend toutefois à s’accroître lorsque l’énergie augmente : le gain d’efficacité est relativement constant pour DXTRAN, tandis que le transport pseudo-déterministe de Phoebe semble améliorer davantage l’efficacité lorsque l’énergie est élevée. Cette différence pourrait s’expliquer par l’application partielle du transport pseudo-déterministe dans Phoebe aux photons issus d’annihilation électron-positon, bien plus nombreux à haute énergie¹⁴.

Globalement, le gain d’efficacité semble ici être plus important dans Phoebe que dans MCNP. Il ne s’agit toutefois que d’un cas d’application très simple, et la réduction de variance dans MCNP comme dans Phoebe n’est pas paramétrée de manière optimale. Des réglages plus fins pourraient modifier le gain d’efficacité dans les deux codes, et une comparaison utilisant la configuration optimale de chaque code pourrait donner des résultats différents. Cette brève

14. La création de paires représente environ 13 % des interactions des photons dans l’eau à 6 MeV et un tiers d’entre elles à 10 MeV.

comparaison donne tout de même une première estimation des performances que l'on peut attendre de la méthode telle qu'implémentée dans Phoebe, par rapport à DXTRAN utilisé de manière basique dans MCNP.

Pour expliquer les différences d'efficacité observées, on s'intéresse ici au temps de simulation moyen d'une histoire, qui peut éventuellement être modifié par le transport pseudo-déterministe puisque cette technique augmente considérablement le nombre de particules suivies. Le tableau 16 ci-dessous donne le nombre moyen d'histoires simulées par chaque code au cours d'une heure de calcul, pour chaque énergie de la source, avec et sans réduction de variance.

TABLE 16 – Nombre d'histoires simulées par heure (en millions) pour chaque code et pour chaque énergie de la source de photons, avec et sans l'utilisation du transport pseudo-déterministe.

Énergie (MeV)	MCNP	MCNP	Phoebe	Phoebe
	Analogue	Transport p.-det.	Analogue	Transport p.-det.
10	20	19	73	71
6	55	50	136	133
2,5	76	35	167	160
1	177	133	335	327
0,5	320	115	400	362
0,1	1022	580	998	957

Que ce soit pour MCNP ou Phoebe, le temps de simulation par histoire augmente avec l'énergie des photons, faisant apparaître une diminution du nombre d'histoires simulées par unité de temps. Phoebe semble simuler les histoires plus rapidement que MCNP, en particulier lorsque l'énergie est importante. On ne peut toutefois exclure que cet écart s'explique par les différences de paramètres physiques entre les deux codes, et il n'est pas nécessairement le reflet d'un transport plus optimisé dans Phoebe à haute énergie. En revanche, il est possible de constater que l'utilisation de DXTRAN dans MCNP augmente de manière importante la durée de simulation des histoires en dessous de 2,5 MeV, effet qui ne se retrouve pas dans le cas de Phoebe, dans lequel le transport pseudo-déterministe diminue le nombre moyen d'histoires simulées par unité de temps de 2 à 4 % seulement. Cette différence pourrait être due à un meilleur tri dans les histoires des particules suivies, via la carte d'importance et les roulettes russes, et pourrait expliquer en partie la différence observée sur l'efficacité. Une étude plus approfondie serait toutefois nécessaire pour déterminer exactement l'origine des disparités entre les deux codes. Cette étude pourrait, par exemple, consister en une comparaison entre MCNP et Phoebe, dans lequel les techniques complémentaires sont ajoutées une à une, permettant ainsi de déterminer lesquelles sont responsables des différences constatées.

7.4 Conclusion

De manière générale, le transport pseudo-déterministe tel qu'implémenté dans ce travail semble être en mesure d'apporter un gain conséquent sur l'efficacité et donc sur le temps de calcul dans la plupart des cas étudiés, tout en garantissant un résultat sans biais. Toutefois,

la méthode seule, sans aucune autre réduction de variance en support, est relativement inefficace. L'étude des rapports d'efficacité lors de l'introduction des techniques auxiliaires a pu mettre en évidence leur nécessité afin d'obtenir une accélération des simulations.

Cette accélération reste très dépendante des paramètres de simulation et de l'estimation réalisée. En particulier, le calcul de la dose dans une région de petite taille sera bien plus accéléré que dans une région étendue, notamment grâce au splitting opéré à l'entrée de la sphère. La série de simulations réalisée pour tester le code en section 7.2.2, bien qu'utilisant des paramètres différents, reste un ensemble de situations relativement proches. On constate pourtant de grandes inégalités dans le gain d'efficacité entre les différents cas. Bien qu'elle ne soit pas généralisable à toutes les applications, l'accélération observée ici donne des indications importantes sur les cas de figure les plus favorables à l'utilisation du transport pseudo-déterministe.

L'apport de l'application de la méthode à d'autres interactions a pu être mis en évidence et quantifié dans une série de simulations dans lesquelles l'interaction testée est une source importante de photons à l'emplacement de la sphère. Pour chaque interaction pour laquelle le transport pseudo-déterministe (même partiel) est possible, à l'exception de l'effet photoélectrique, l'efficacité est améliorée. Ce résultat indique que cette modification de la méthode permet de la rendre plus efficace dans les cas où de nombreux photons déposant de l'énergie hors-champ ne proviennent pas directement de diffusions, et ainsi de généraliser son utilisation. Dans un cas réel, étant donné la gamme d'énergies présentes dans un faisceau de photons, il est possible que la dose soit déposée par des particules provenant d'une multitude d'interactions dans de nombreux matériaux différents, et donc que chaque application supplémentaire du transport pseudo-déterministe ait son importance.

Enfin, la comparaison avec une autre implémentation du transport pseudo-déterministe, la méthode DXTRAN du code MCNP, permet une première évaluation des performances de cette réduction de variance dans Phoebe par rapport à un autre code déjà largement validé. Par rapport à la configuration par défaut de DXTRAN, le transport pseudo-déterministe de Phoebe permet une accélération 2 à 10 fois plus importante, et tend à donner de meilleurs résultats lorsque l'énergie de la source est élevée.

La méthode étant validée numériquement, la dernière étape de cette thèse consiste à confronter les résultats obtenus à des mesures effectuées sur des cas réels. Le prochain chapitre comprend deux parties : la première est une étude des doses hors-champ dans le cas d'un faisceau de photons émis par un tube à rayons X de basse énergie, et la seconde partie concerne un cas d'application pour la modélisation d'un accélérateur linéaire médical.

8 Validation expérimentale et application

8.1 Introduction

Ce chapitre est consacré dans un premier temps à une validation de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe, cette fois expérimentale. Dans cet objectif, une installation a été choisie pour sa simplicité de modélisation : une casemate parallélépipédique en plomb, surmontée d'un tube à rayons X, permet de s'affranchir de toutes les contributions extérieures à la dose hors-champ telles que les fuites ou les diffusions sur des éléments externes. Cette configuration est utilisée pour effectuer des mesures de dose en périphérie du faisceau, qui sont ensuite comparées au résultat obtenu avec Phoebe.

La seconde partie du chapitre est une application au second problème majeur généralement rencontré en Monte-Carlo pour l'estimation de la dose hors-champ : la fiabilité de la modélisation des conditions d'irradiations. Un modèle d'accélérateur linéaire médical a été mis au point dans le laboratoire pour réaliser des calculs de dose dans le champ, et a déjà été très largement utilisé et validé pour cette tâche. Toutefois, il n'a jamais été utilisé pour l'estimation des doses à distance du champ, et l'absence de certains éléments de la tête de l'accélérateur pourrait avoir un effet important sur le niveau de dose périphérique calculé. Les erreurs de modélisation peuvent être corrigées, mais l'imprécision du calcul rend le processus de rectification du modèle extrêmement long, voire impossible en simulation analogue. Le transport pseudo-déterministe est utilisé ici pour obtenir rapidement une estimation des doses hors-champ pour différentes modélisations de l'accélérateur. Ces doses sont comparées à des mesures réalisées à l'aide d'une chambre d'ionisation afin d'évaluer puis corriger la modélisation de la machine.

8.2 Dose hors-champ à basse énergie

8.2.1 Configuration étudiée

Configuration expérimentale

La source de rayonnements utilisée est un tube à rayons X type Oxford Trinity, utilisé sous une tension de 80 kV et un courant de 0,5 mA. D'après les données du constructeur, la cible de tungstène est inclinée de 20° par rapport à la verticale, et le point d'émission des photons est situé à 2,49 cm de la sortie de l'appareil, constituée d'un filtre de verre d'épaisseur 1,4 mm puis d'un filtre de polyéthylène téréphthalate (PET) d'épaisseur 3,6 mm. La sortie du tube est circulaire, de diamètre 2,54 cm. Celui-ci est placé à 1,5 cm au-dessus d'une casemate de plomb de dimensions 29×28×50 cm³, d'épaisseur 2 mm, possédant une ouverture circulaire de diamètre 2,7 cm au centre de sa face supérieure. Cette configuration est représentée sur la figure 74 ci-après.

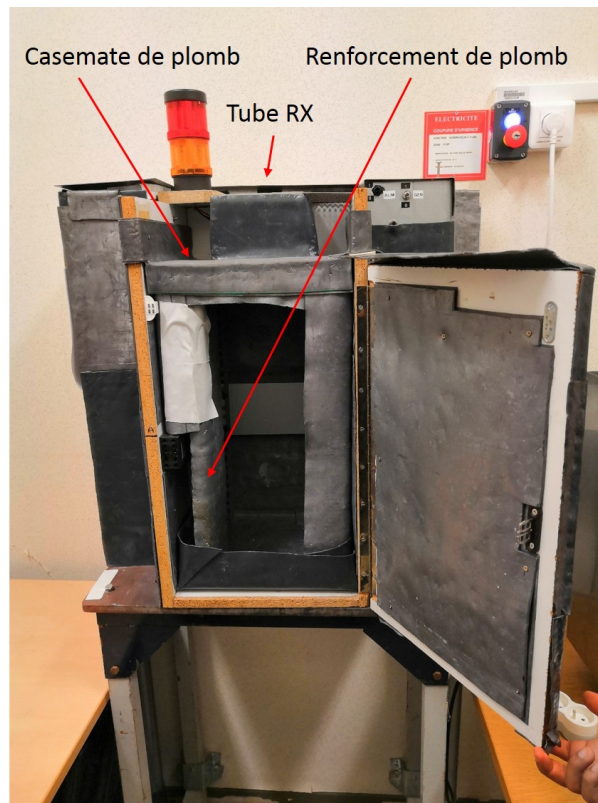


FIGURE 74 – Configuration expérimentale utilisée pour la validation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe, composée d'une casemate de plomb surmontée d'une source de rayons X.

Un renforcement de plomb de dimensions $6,5\text{ cm} \times 11,4\text{ cm}$, destiné à la radioprotection, est également présent à l'intérieur de la casemate et s'étend sur la totalité de sa hauteur. Il est visible à gauche sur la figure 74.

Compte tenu de la distance séparant la source de rayonnements de la casemate et du diamètre d'ouverture de celle-ci, le demi-angle du cône formé par le faisceau est de $21,4^\circ$. Cet angle étant supérieur à l'angle d'inclinaison de la cible (20°), le faisceau est asymétrique et est limité d'un côté par la cible elle-même. Cet effet peut être mis en évidence à l'aide de films radiochromiques, sur lesquels (voir figure 75) on peut observer l'«ombre» de la cible de tungstène (ou effet talon).

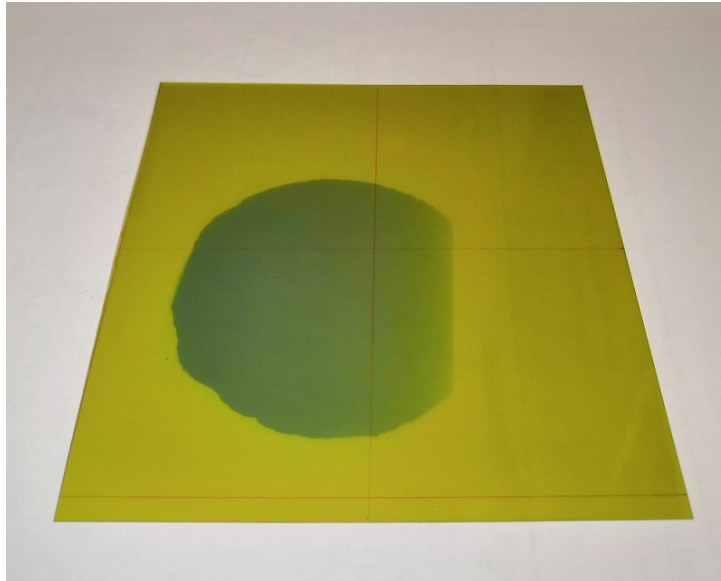
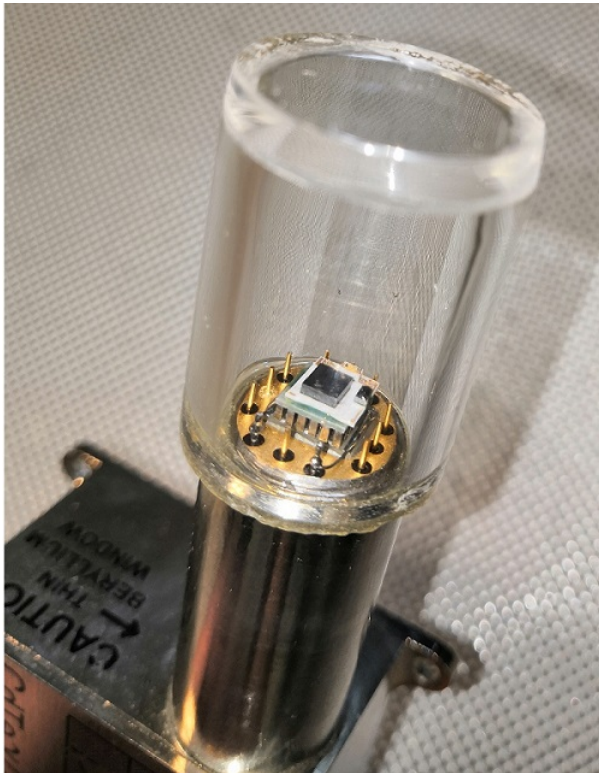


FIGURE 75 – Film GAFchromic™ EBT-3 placé perpendiculairement au faisceau et irradié à l'aide du tube Oxford Trinity.

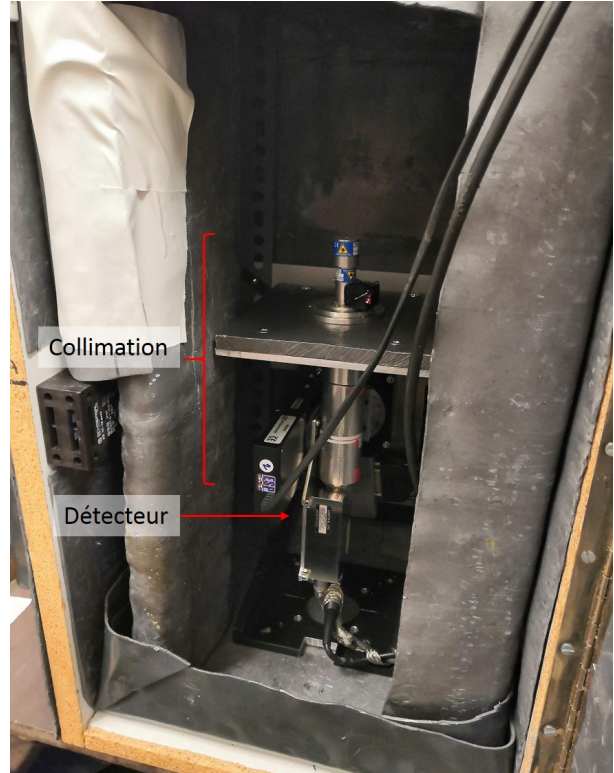
La détermination de la configuration exacte à simuler a fait l'objet d'un stage de master 2 encadré au cours de cette thèse. Compte tenu des informations disponibles via le constructeur du tube Oxford Trinity, une part importante de sa géométrie et son positionnement ont dû être déduits par l'irradiation de films radiochromiques EBT-3 placés à différentes hauteurs dans la casemate. Nous avons pu déterminer, grâce à la position des tâches observées sur les films, que l'axe du faisceau et l'ouverture du tube Oxford sont décalés de 3 mm vers la gauche par rapport à l'ouverture de la casemate. Ce décalage a pour effet d'accentuer encore davantage l'asymétrie du faisceau, mais est pris en compte dans les simulations.

Détecteurs utilisés

Afin de pouvoir contrôler la fidélité du spectre calculé des photons émis par le tube à rayons X, ce dernier est d'abord mesuré à l'aide du détecteur à semi-conducteur (un cristal de 9 mm² de tellure de cadmium ou CdTe) Amptek XR-100T utilisé au sein du Laboratoire de Métrologie de la Dose (LMD) du Laboratoire National Henri Becquerel (LNHB) [Plagnard, 2016], représenté sur la figure 76.



(a) Détecteur CdTe Amptek XR-100T



(b) Positionnement du détecteur dans la casemate

FIGURE 76 – Détecteur semi-conducteur CdTe utilisé pour la mesure du spectre en énergie des photons (a), placé dans la casemate de plomb et surmonté de son système de collimation (b).

La procédure de mesure est associée à une série de corrections des déformations du spectre liées aux interactions des photons dans le détecteur. L’algorithme utilisé, décrit plus en détail dans la Revue française de métrologie [Plagnard, 2016], permet de prendre en compte :

- Les empilements électroniques,
- La forme de la réponse spectrale du détecteur,
- La traîne des pics,
- Les échappements,
- Le rendement de détection.

Le détecteur est utilisé avec une collimation de tungstène de très faible ouverture afin de limiter le débit de photons entrants. Un banc motorisé permet un alignement précis entre le système de collimation et le faisceau.

Les mesures de dose dans le champ sont quant à elles réalisées à l’aide d’un détecteur de type photodiode (modèle Radcal AGMS-D+, figure 77 ci-dessous).



FIGURE 77 – Détecteur Radcal AGMS-D+ utilisé pour les mesures de dose dans le champ.

Ce dernier est conçu pour être utilisé avec des faisceaux de 40 kV à 160 kV et peut donc servir ici pour des mesures de dose dans le faisceau. En revanche, le détecteur possède une grande dépendance directionnelle : l'ouverture circulaire, de diamètre 10 mm, est située sur sa face supérieure, et le détecteur est lui-même entouré d'un boîtier métallique de densité élevée bloquant la majorité des rayonnements. Contrairement aux mesures dans le faisceau, au cours desquelles la majorité des photons proviennent directement de la cible, la totalité des photons parvenant au détecteur placé hors-champ sont issus de diffusions ou de fluorescence et peuvent ainsi provenir de directions plus variées. Le détecteur a donc tendance à sous-estimer la dose hors-champ de 50 % à 100 % selon son orientation.

Le détecteur utilisé pour les mesures de dose hors-champ est une chambre d'ionisation cylindrique PTW 30013 Farmer, représentée en figure 78, dont les conditions nominales d'utilisation correspondent à des faisceaux de 30 kV à 50 MV. L'électrode centrale étant constituée d'aluminium, elle devrait donc présenter une faible dépendance en énergie [Kry *et al.*, 2017] dans les conditions d'irradiation rencontrées ici, même hors-champ. Le spectre en énergie sera tout de même mesuré et simulé au préalable afin de s'assurer que la chambre peut être utilisée sans nécessiter de correction.



FIGURE 78 – Chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer utilisée pour les mesures de dose hors-champ.

Configuration de simulation

Le tube Oxford Trinity est modélisé par une boîte de plomb de 5 mm d'épaisseur, dans laquelle est placée une cible de tungstène inclinée de 20°, dont le point focal est situé à 2,49 cm

de la sortie du filtre de PEEK, et vers laquelle des électrons de 80 keV sont émis. Les autres dimensions et les mesure de la casemate sont identiques à la description faite précédemment. La configuration utilisée est représentée ci-après sur les figures 79 et 80.

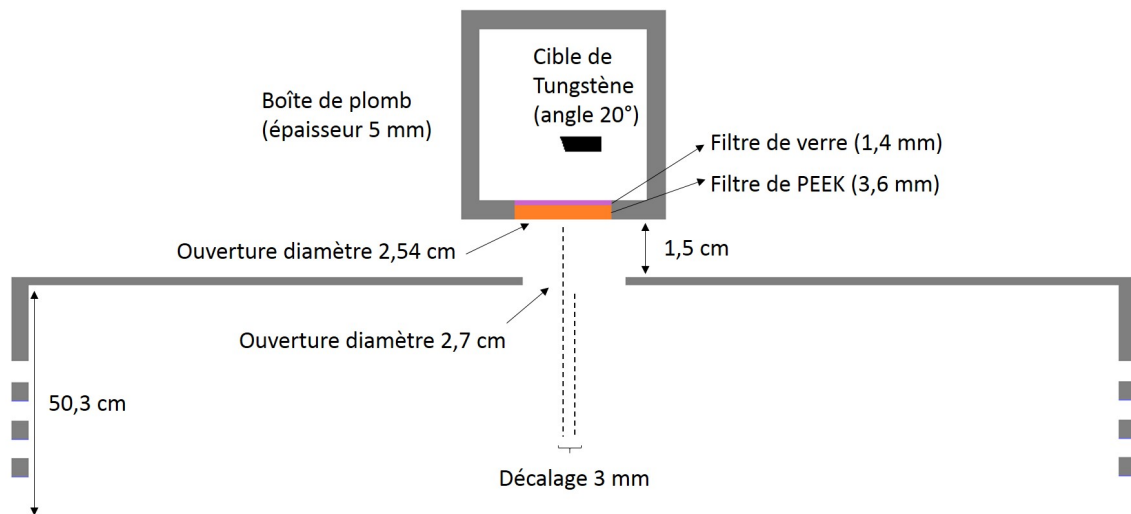


FIGURE 79 – Représentation en coupe verticale de la casemate et de la modélisation du tube Oxford Trinity.

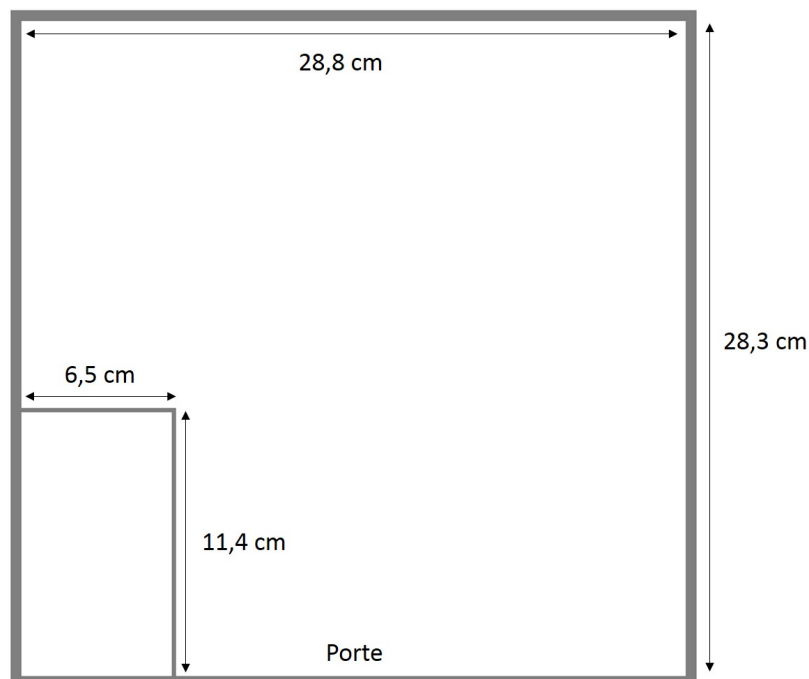


FIGURE 80 – Représentation en coupe horizontale de la casemate et du renforcement de plomb à son entrée.

Afin d'accélérer la simulation, un fichier d'espace des phases contenant les photons générés par 10^{10} électrons primaires est enregistré au préalable à la sortie de la cible du tube

Oxford. Ce fichier est ensuite réutilisé 50 fois en tant que source de particules pour chaque simulation, ce qui représente une durée de quelques heures sur 160 processeurs.

Lorsque le transport pseudo-déterministe est utilisé, la carte d'importance recouvre exactement la casemate de plomb et s'étend jusqu'à l'extrémité supérieure du tube. Elle contient $30 \times 30 \times 30$ voxels de dimensions proches de $1 \text{ cm} \times 1 \text{ cm} \times 2 \text{ cm}$, et elle est calculée à partir des 10 000 premiers photons déterministes.

8.2.2 Spectre en énergie des photons

En premier lieu, avant d'estimer les doses hors-champ dans cette configuration, on souhaite connaître le spectre en énergie des photons émis par la source de rayonnements, qui permet de déterminer si le détecteur choisi est adapté pour les énergies rencontrées et si la modélisation du tube est suffisamment réaliste. Le spectre est donc mesuré à l'aide du détecteur CdTe, dans un premier temps au centre du faisceau suivant la configuration représentée sur la figure 76 (b), puis simulé avec Phoebe à l'aide de la configuration de la figure 79 pour 100 intervalles en énergie entre 0 et 100 keV. Les deux spectres obtenus sont comparés ci-dessous sur la figure 81, où l'intégrale est normalisée à l'unité.

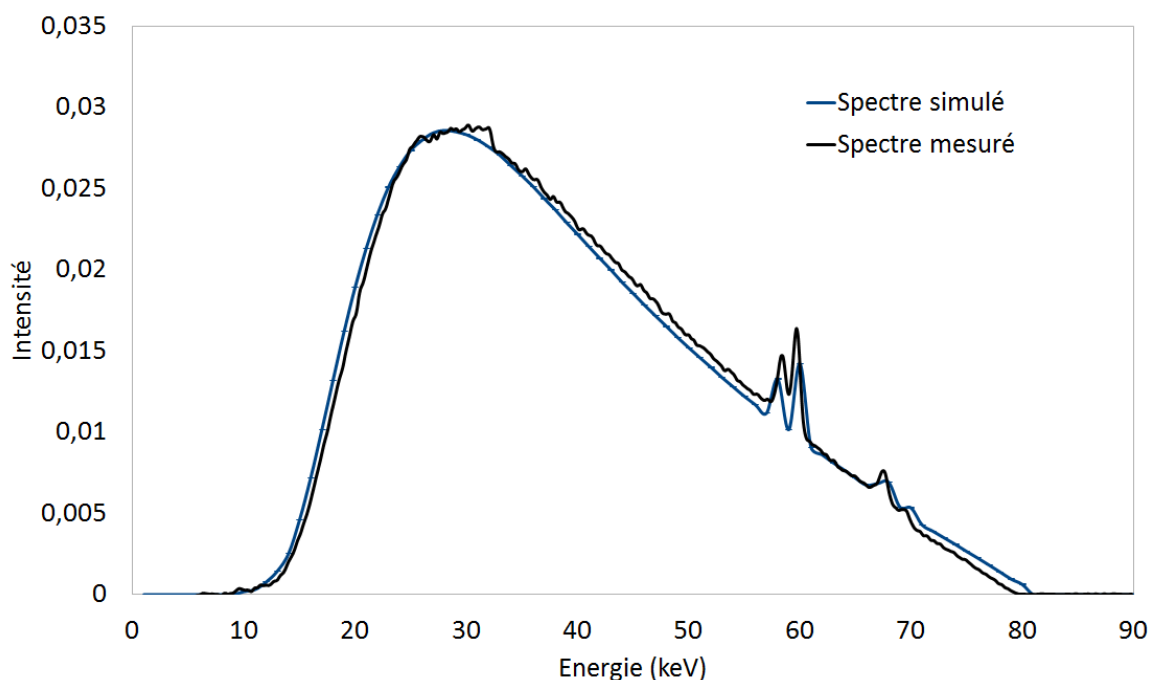


FIGURE 81 – Spectres en énergie des photons émis par le tube Oxford Trinity, mesuré et simulé à l'aide de Phoebe.

Les deux spectres, de formes très proches, présentent l'allure typique obtenue pour un tube à rayons X à une tension de 80 kV avec une anode en tungstène : un fond de rayonnement de freinage coupé aux basses énergies par la filtration, avec la présence des raies caractéristiques de la cible de tungstène. L'énergie moyenne est de 39 keV et l'énergie maximale de 80 keV.

Une mesure du spectre hors-champ est ensuite réalisée à 4 cm du haut de la casemate, contre la paroi droite de cette dernière, tel que représentée sur la figure 82.



FIGURE 82 – Détecteur CdTe placé hors-champ sans collimation ni banc motorisé pour la mesure du spectre en énergie des photons.

Le détecteur CdTe est ici utilisé sans aucune collimation. Compte tenu de l'importante augmentation du flux de photons par rapport à la configuration de la figure 76 (b), de la différence attendue dans la forme du spectre par rapport à la mesure dans le champ, et de l'absence de la collimation limitant les interactions des photons sur l'électronique du détecteur, les conditions de mesures sont relativement éloignées de celles permettant d'appliquer l'algorithme de correction normalement employé afin de corriger des spectres réalisés dans le champ. Il n'est alors pas possible de s'assurer qu'il reflète parfaitement le spectre réellement émis par le tube.

Cette configuration est ensuite simulée à l'aide de la modélisation de la figure 79. Le spectre est estimé dans une sphère de rayon 1,5 cm positionnée à 10 cm à droite de l'axe du faisceau, et à 4 cm de la face supérieure de la casemate. Les résultats sont donnés sur la figure 83 ci-dessous.

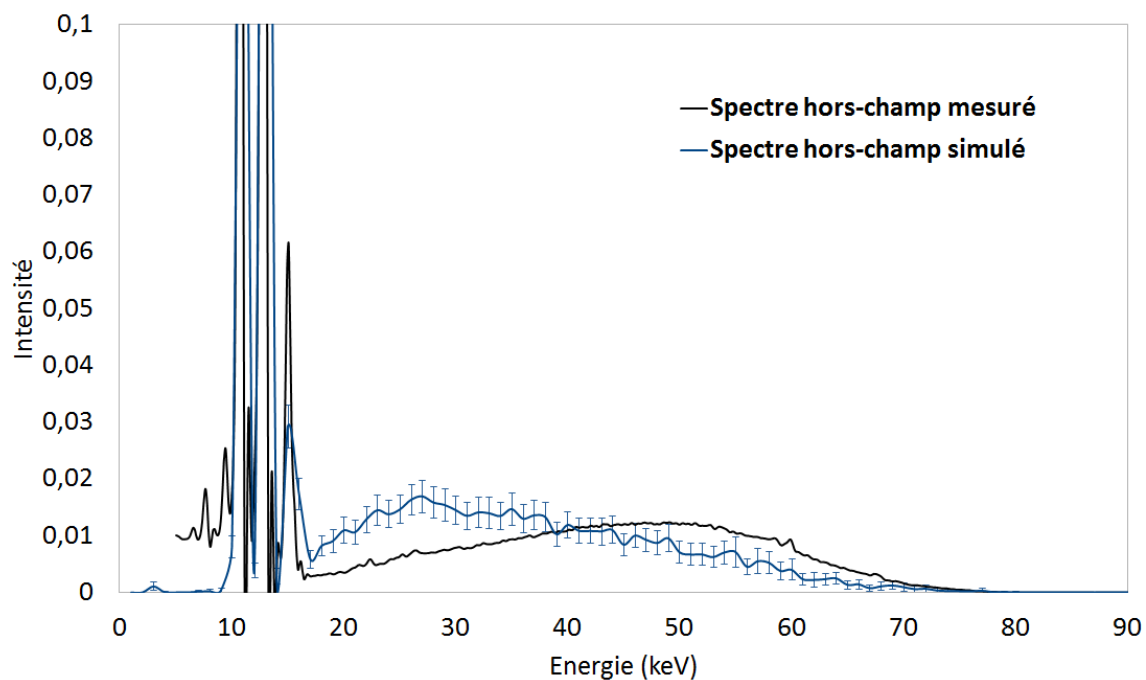


FIGURE 83 – Spectres en énergie des photons hors du champ dans l'enceinte de plomb de la configuration de la figure 79, mesuré et simulé avec Phoebe.

Le spectre mesuré présente une allure très différente de celui obtenu dans le champ, avec une forme plus arrondie présentant un maximum aux alentours de 50 keV et une moyenne à 25 keV. Les raies caractéristiques du tungstène sont maintenant absentes, mais laissent place à des pics situés entre 10 et 15 keV correspondant aux transitions L_{α} , L_{β} et L_{γ} du plomb, vraisemblablement émis par fluorescence suite à l'absorption de photons dans les parois de la casemate.

Bien que la forme du spectre simulé soit quelque peu différente, l'énergie moyenne est presque identique (24 keV). Seuls les pics observés à basse énergie sont communs aux mesures et aux simulations. De nombreux facteurs peuvent influencer sur cette différence, notamment les conditions de mesures et les corrections du spectre. Malgré les différences observées, compte tenu des énergies en jeu, il est raisonnable de considérer que la chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer devrait être en mesure de fournir une mesure de dose fiable en dehors du faisceau.

8.2.3 Profil de dose dans le champ

En vue de valider la modélisation de la source de rayonnements et de la casemate de plomb, un profil de dose dans le champ est mesuré à l'aide du détecteur Radcal AGMS-D+ puis simulé avec Phoebe. Les mesures sont réalisées tous les centimètres selon l'axe gauche-droite à 18,4 cm de «profondeur» à partir de l'ouverture circulaire de la casemate et à 0,5 cm vers l'avant par rapport à l'axe du faisceau. Le résultat est donné ci-dessous sur la figure 84.

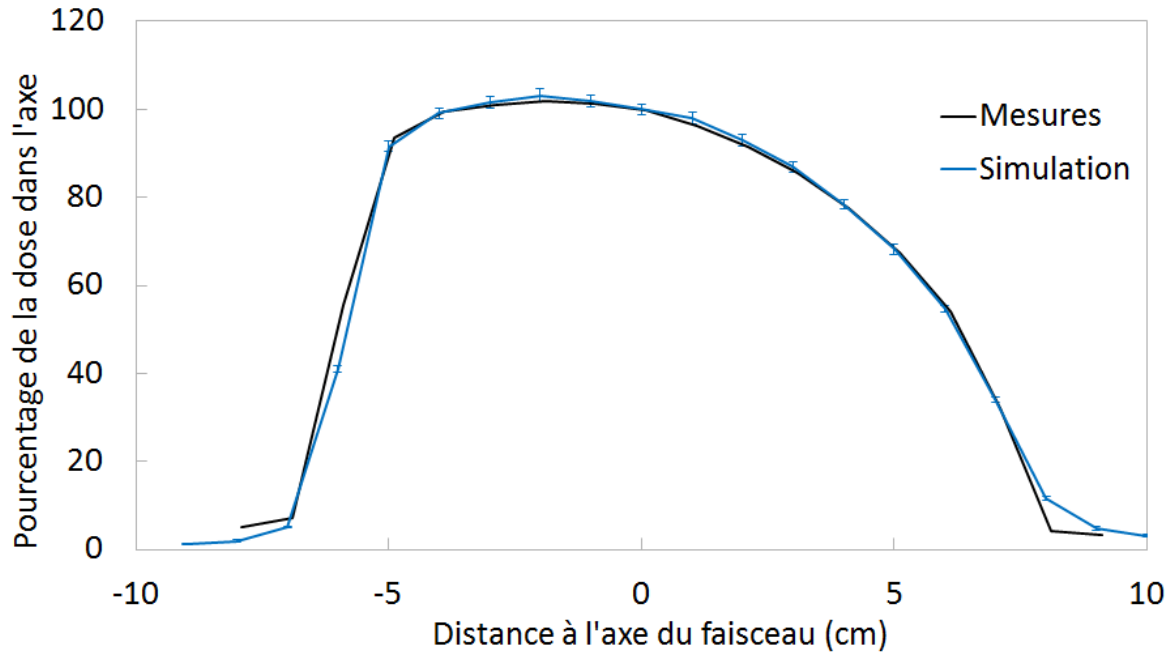


FIGURE 84 – Profil de dose mesuré, et simulé avec Phoebe dans la configuration de la figure 79.

La forme observée sur les films radiochromiques de la figure 75 se retrouve sur le profil de dose : il est interrompu abruptement sur la gauche par la collimation, et décroît plus lentement sur sa partie droite par effet talon. Globalement, l'accord entre la mesure et la simulation est très bon et la configuration utilisée dans Phoebe sera donc adoptée pour estimer les doses hors-champ.

8.2.4 Mesure et estimation de la dose hors-champ

La mesure de dose hors-champ est réalisée à l'aide de la chambre d'ionisation PTW Farmer 30013 à deux positions de part et d'autre du faisceau. La chambre est placée à 16,2 cm de profondeur dans la casemate aux positions représentées sur la figure 85 ci-dessous. L'emplacement par rapport au centre du faisceau est repéré à l'aide d'un film radiochromique placé dans la casemate durant la mesure.

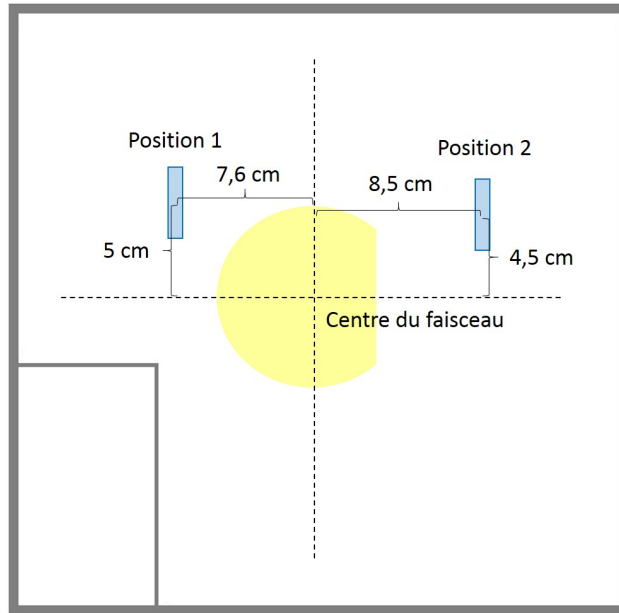


FIGURE 85 – Emplacements dans la casemate de la chambre d’ionisation PTW 30013 Farmer utilisée pour la mesure de dose hors-champ.

On notera que la mesure avec le détecteur Radcal AGMS-D+, bien qu’elle sous-estime la dose en raison de la forte dépendance angulaire de ce dernier, permet tout de même d’obtenir un résultat proche de celui obtenu à l’aide de la chambre d’ionisation (un écart de l’ordre de quelques pourcents), à condition de sommer les valeurs obtenues en orientant le détecteur vers le haut, vers le bas, puis vers le faisceau. Cela donne par ailleurs des indications intéressantes sur la distribution spatiale des photons dans le volume de mesure.

Au niveau de la simulation, le calcul est réalisé pendant de 7 heures sur 80 processeurs. La probabilité qu’une particule atteigne la chambre d’ionisation étant extrêmement faible, et les interactions des photons étant très peu probables dans l’air, la dose estimée en simulation analogue est nulle car aucun dépôt d’énergie n’a été comptabilisé. Le calcul utilisant le transport pseudo-déterministe permet d’obtenir un résultat, mais l’incertitude statistique est encore importante (de l’ordre de 30 % à 50 %) et la valeur fluctue encore beaucoup avec le temps.

Une méthode permettant de contourner le problème lié à la faible probabilité d’interaction dans la chambre consiste à estimer directement le courant créé dans celle-ci à partir du spectre en énergie des photons qui y entrent. Le spectre est en effet plus facile à obtenir, car il ne nécessite pas que le photon interagisse dans le volume d’air de la chambre. Notons que dans ce cas également, trop peu de particules atteignent la chambre pour estimer le spectre en simulation analogue.

Le courant créé dans la chambre $I_{chambre}$ est estimé à partir de la relation suivante :

$$I_{chambre} = \sum_i \left(\sum_E \frac{I_{tube}}{e} N(E) \left(1 - e^{-\mu_i(E)\bar{D}} \right) T_i \frac{e}{W_{air}} \right) \quad (222)$$

Pour chaque interaction i créant une paire électron-ion (Compton ou photoélectrique), le courant créé dans la chambre est la somme du courant créé par les photons du spectre pour

chaque intervalle en énergie E entre 0 et 80 keV. La valeur I_{tube}/e représente le rapport du courant du tube à rayons X par la charge d'un électron, et correspond donc au nombre d'électrons émis par le tube par unité de temps. $N(E)$, qui est donné par la simulation, est le nombre de photons d'énergie comprise dans l'intervalle E traversant la chambre par électron source. Le produit $N(E)I_{tube}/e$ donne donc le nombre de photons d'énergie comprise dans E traversant la chambre par unité de temps. L'expression $1 - \exp(-\mu_i(E)\bar{D})$ donne la probabilité d'interaction d'un photon d'énergie E (ici considérée égale à la valeur centrale de l'intervalle E) sur la distance moyenne traversée par les photons atteignant la chambre (\bar{D}), permettant d'obtenir avec les termes précédents le nombre d'interactions des photons d'énergie comprise dans E par unité de temps. Enfin, T_i est l'énergie moyenne déposée dans la chambre par un électron créé par l'interaction i . La quantité calculée jusqu'alors correspond donc à l'énergie moyenne déposée dans la chambre par seconde (pour une interaction donnée et une énergie donnée). Une fois divisée par l'énergie moyenne d'ionisation de l'air (W_{air}), on obtient une approximation du nombre de paires électron-ion créées dans la chambre par unité de temps, qui peut ensuite être convertie en courant en la multipliant par e .

Estimation de la distribution des photons incidents

Le courant du tube à rayons X est égal à 0,5 mA en continu, soit environ $3,12 \cdot 10^{15}$ électrons émis par seconde. Le nombre de photons incidents $N(E)$ est estimé par simulation à l'aide de Phoebe et du transport pseudo-déterministe. La simulation analogue, quant à elle, ne permet pas d'obtenir un résultat exploitable dans un temps raisonnable.

La chambre d'ionisation est modélisée par un cylindre d'air de longueur 2,3 cm et de rayon 0,305 cm, positionné comme indiqué sur la figure 85. La sphère pseudo-déterministe est centrée sur la chambre et son rayon est de 1,19 cm (la chambre est alors entièrement comprise dans la sphère). On estime dans cette configuration le spectre en énergie des photons arrivant sur la chambre $N(E)$ sur 100 intervalles en énergie entre 0 et 80 keV.

Estimation de la probabilité d'interaction des photons

La distance moyenne traversée par un photon arrivant sur la chambre est calculée en considérant qu'elle est équivalente à la corde moyenne d'un cercle de rayon égal à celui de la chambre, soit la distance D moyenne sur la figure 86 (a) ci-après. Cette dernière est ensuite divisée par $\cos \alpha$ pour tenir compte de l'angle d'incidence des photons sur la chambre, tel que représenté sur la figure 86 (b).

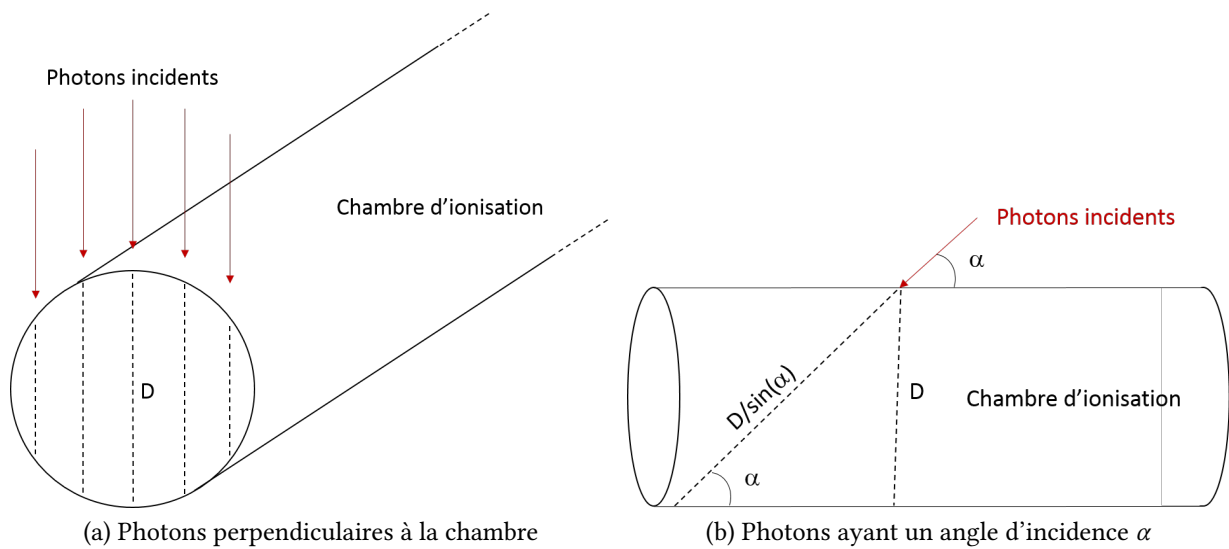


FIGURE 86 – Représentation des distances traversées dans la chambre d’ionisation par des photons perpendiculaires à sa surface en (a) et présentant un angle d’incidence α en (b).

Pour approximer l’angle d’incidence moyen α des photons sur la chambre d’ionisation, la simulation utilisant le transport pseudo-déterministe est réalisée à nouveau en remplaçant l’air à l’intérieur de la chambre par de l’eau, de manière à augmenter la probabilité d’interaction des photons à l’intérieur. On affiche ensuite la carte de l’incertitude obtenue sur la dose dans cette configuration, présentée sur la figure 87 ci-après.

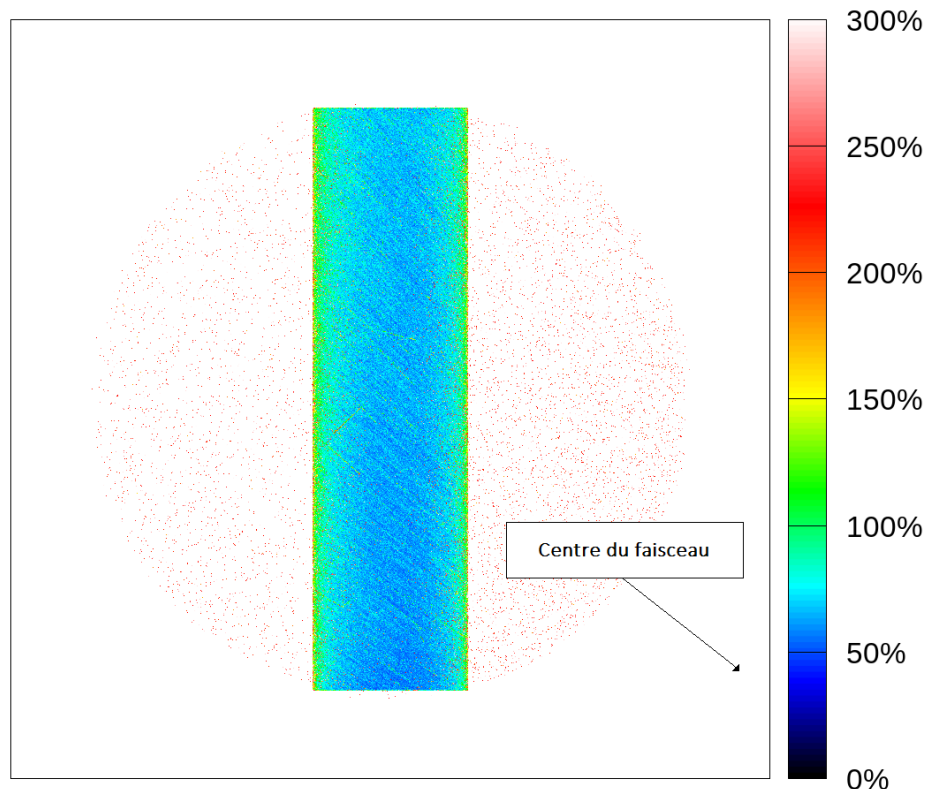


FIGURE 87 – Carte d’incertitude relative sur la dose obtenue avec le transport pseudo-déterministe au niveau de la chambre d’ionisation pour la position 1 de la figure 85, pour laquelle l’air a été remplacé par de l’eau pour faire apparaître les trajectoires des photons subissant un splitting important.

Dans cette configuration, les photons issus des diffusions dans l’air le long du faisceau et sur la collimation de la casemate sont responsables de la grande majorité de la dose au niveau de la chambre. Lorsqu’ils atteignent la sphère pseudo-déterministe, ils subissent un splitting important en raison du poids élevé qu’ils portent. Ce splitting fait apparaître une ligne sur la carte d’incertitude, correspondant à l’ensemble des points d’interaction des photons supplémentaires créés. L’angle que forment ces lignes avec l’axe de la chambre est estimé ici à 48° (angle mesuré au centre de la chambre) pour la première position, et 69° pour la seconde.

On obtient finalement une distance moyenne $\bar{D} = 0,4791 / \sin(48^\circ) = 0,65$ cm pour la première mesure, et 0,51 cm pour la seconde. Cette distance moyenne et les sections efficaces d’interaction des photons permettent alors d’estimer la probabilité d’interaction d’un photon dans la chambre pour chaque intervalle en énergie. On considère ici, pour chaque intervalle, que les photons sont de même énergie (à nouveau égale à la valeur centrale de l’intervalle).

Estimation de l’énergie déposée par électron créé

Enfin, l’énergie moyenne déposée dans la chambre par un électron créé pour chaque interaction est estimée par simulation en suivant la procédure représentée sur la figure 88 ci-dessous.

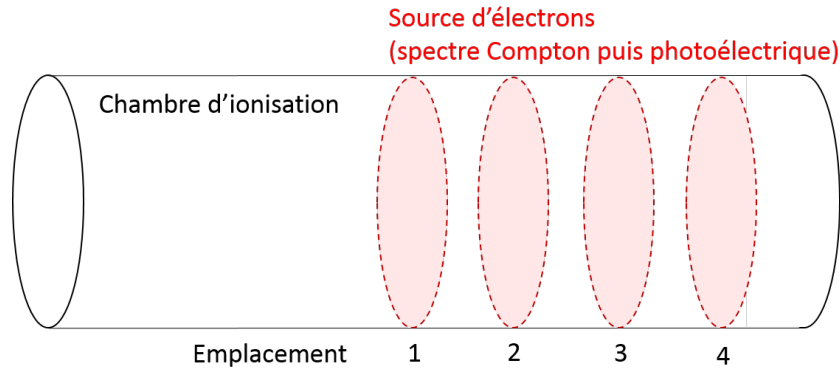


FIGURE 88 – Configuration utilisée pour estimer l'énergie moyenne déposée par électron Compton et par photoélectron dans la chambre d'ionisation.

La chambre d'ionisation est à nouveau modélisée par un cylindre d'air de longueur 2,3 cm et de rayon 3,05 cm. À l'intérieur, une source circulaire et isotrope d'électrons, de rayon égal à celui de la chambre, est placée sur son axe central en quatre positions : au centre de la chambre, puis tous les 0,2875 cm (soit un huitième de sa longueur). Dans un premier temps, cette source émet des particules selon la distribution en énergie des électrons créés par diffusion Compton dans la chambre. L'énergie moyenne déposée par électron est calculée par simulation pour les quatre positions, puis l'approximation de $T_{Compton}$ est la moyenne des quatre valeurs ainsi obtenues. L'opération est ensuite répétée avec la distribution en énergie des photoélectrons produits pour obtenir T_{Photo} .

La distribution des électrons Compton est obtenue à partir du spectre des photons incidents. Pour un photon d'énergie E_γ subissant une diffusion Compton, l'énergie moyenne de l'électron émis E_e peut être approximée par [Herbert, 2007] :

$$E_e = E_\gamma \left(a - \frac{11}{5} a^2 + \frac{51}{10} a^3 \right) \quad (223)$$

avec $a = E_\gamma / m_e c^2$ où m_e est la masse de l'électron. Pour chaque intervalle en énergie E des photons incidents, l'énergie moyenne d'un électron Compton potentiellement créé dans la chambre est estimée à l'aide de la relation 223. On considère à nouveau des photons de même énergie sur tout l'intervalle (égale à sa valeur centrale).

À chaque intervalle d'énergie des photons incidents E correspond ainsi une énergie des électrons émis par diffusion Compton E_e . Chacune de ces énergies est associée à une probabilité d'émission égale au nombre de photons incidents $N(E)$ multiplié par la probabilité de diffusion Compton sur la longueur moyenne traversée, tous deux calculés précédemment. On obtient ainsi la distribution en énergie des électrons utilisée pour la source de la figure 88.

Ce procédé est ensuite répété pour l'interaction photoélectrique, pour laquelle on considère que l'énergie du photoélectron est égale à l'énergie du photon incident (l'énergie de liaison des électrons dans l'air, au maximum de quelques centaines d'eV, est négligée). On obtient finalement $T_{Compton} = 2,7$ keV et $T_{Photo} = 6,8$ keV pour la mesure 1, et $T_{Compton} = 2,3$ keV et $T_{Photo} = 6,9$ keV pour la mesure 2.

Bilan

En considérant une énergie d'ionisation moyenne de l'air W_{air} de 35 eV, la relation 222 permet finalement d'obtenir une estimation du courant créé dans la chambre et donc du débit de dose mesuré. L'ensemble de la procédure décrite ici est ensuite réalisée à nouveau pour le second point de mesure représenté sur la figure 85. Les résultats obtenus pour les deux mesures et les deux simulations sont présentés ci-dessous dans le tableau 17.

TABLE 17 – Courant et débit de dose obtenus par mesure et par simulation dans la configuration de la figure 85 pour les deux positions de la chambre. Le coefficient d'étalonnage de la chambre est de $4,725 \cdot 10^7$ Gy/C.

Position 1	Courant (pA)	Débit de dose (mGy/min)	Écart à la mesure
PTW 30013	1,115	3,16	-
Simulation	0,646	1,714	-45,76 %
Position 2	Courant (pA)	Débit de dose (mGy/min)	Écart à la mesure
PTW 30013	0,684	1,94	-
Simulation	0,765	2,170	11,87 %

Pour la première position de mesure, l'estimation du débit de dose est inférieure d'environ 46 % à la mesure. Bien que l'écart semble important, ce résultat est tout à fait raisonnable compte tenu des nombreuses approximations réalisées, et montre que l'ordre de grandeur de la dose peut être obtenu à l'aide du transport pseudo-déterministe dans un cas où la simulation analogue n'est pas capable de donner un résultat exploitable. Pour la seconde position de mesure en revanche, l'accord avec le débit de dose mesuré est meilleur : l'approximation surestime le débit de dose de seulement 12 %. Bien sûr, ce faible écart est associé à une incertitude potentiellement élevée (mais difficile à calculer), liée aux approximations réalisées et à l'incertitude statistique sur le spectre utilisé.

Ces résultats montrent que la dose obtenue à l'aide du transport pseudo-déterministe reste fiable, malgré l'impossibilité d'obtenir un résultat en simulation analogue dans le même temps. Par ailleurs, cette absence de résultat analogue sur la durée choisie pour le calcul entraîne l'impossibilité d'estimer son efficacité. Une simulation analogue exactement identique mais de longue durée (50 heures contre 5 auparavant) a donc été réalisée afin d'obtenir des dépôts d'énergie dans la chambre d'ionisation et ainsi une première estimation de l'efficacité, qui s'avère être environ 1300 fois inférieure à celle obtenue à l'aide du transport pseudo-déterministe.

Suite à cette première validation expérimentale, le code est utilisé au cours d'une étude des doses hors-champ occasionnées par un accélérateur linéaire médical, dans laquelle les simulations analogues ne sont, à nouveau, pas capables de donner un résultat suffisamment précis. L'objectif est alors d'utiliser le transport pseudo-déterministe pour améliorer la modélisation de l'appareil afin d'obtenir des doses périphériques en accord avec l'expérience.

8.3 Application : dose hors-champ pour un accélérateur linéaire médical

Cette application de l'implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe consiste à simuler l'irradiation d'une cuve à eau par un accélérateur linéaire médical Elekta

Versa HD. Cette simulation est comparée à des mesures de dose préalablement réalisées à l'aide d'une chambre d'ionisation, de manière à évaluer et éventuellement corriger le modèle d'accélérateur utilisé dans les simulations. L'utilisation du transport pseudo-déterministe permet ici de réaliser une estimation précise et rapide de la dose hors-champ dans les différentes configurations simulées.

8.3.1 Configuration expérimentale

L'appareil utilisé est l'accélérateur linéaire médical Elekta Versa HD, équipé d'un collimateur multilame Agility™. Le faisceau de photons, émis à partir d'électrons de 6 MeV, forme un champ carré de $10 \times 10 \text{ cm}^2$. Une cuve à eau PTW de $59,5 \times 59,5 \times 50 \text{ cm}^3$, remplie jusqu'à une hauteur de 40,5 cm, est placée sous la tête de l'accélérateur. La distance séparant la source de rayonnements de la surface de l'eau est de 90 cm, et la cuve est décalée de 20 cm dans la direction tête-pied afin d'augmenter la distance disponible hors-champ. Cette configuration est représentée ci-après sur la figure 89 (b).

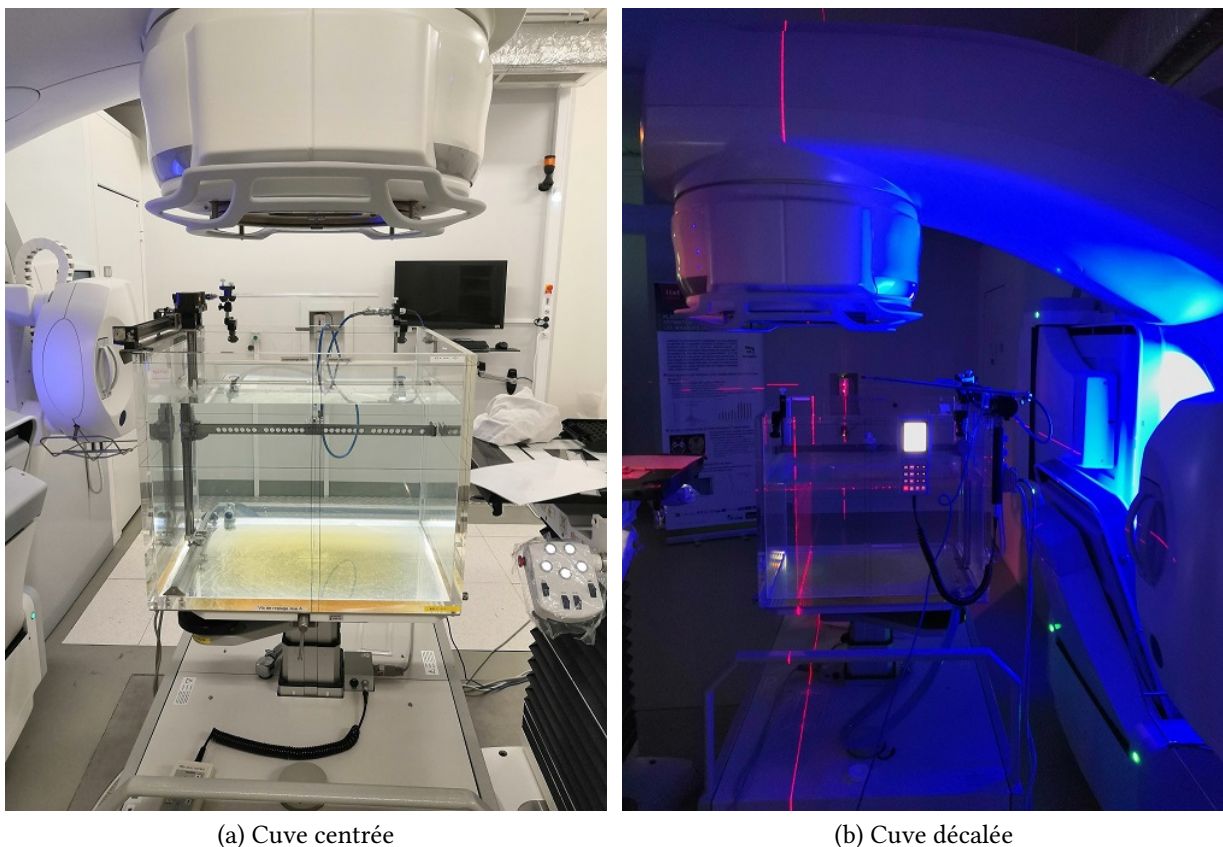


FIGURE 89 – Configuration de mesure avec cuve centrée en (a) et cuve décalée en (b) pour des mesures selon l'axe tête-pieds.

Le détecteur utilisé est une chambre d'ionisation PTW 30013 Farmer, du même modèle que celle qui a servi aux mesures hors-champ en 8.2.1. Le faisceau entre dans les conditions nominales d'utilisation de la chambre, mais le spectre en énergie hors-champ sera tout de même simulé au préalable afin de s'assurer que la chambre peut être utilisée sans correction.

8.3.2 Configuration de simulation

La simulation est réalisée à l'aide d'un modèle de la tête de l'accélérateur Elekta Versa HD normalement utilisé pour le calcul des doses délivrées dans le champ, et basée sur les plans industriels des éléments de la tête mettant en forme le faisceau, fournis par le constructeur. Une représentation de la géométrie utilisée est donnée sur la figure 90.

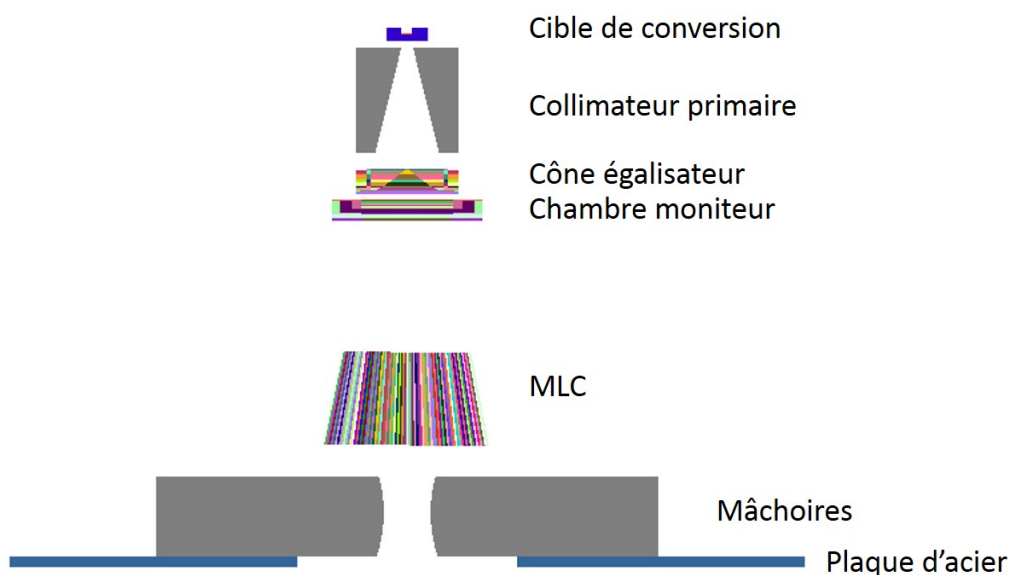


FIGURE 90 – Coupe verticale et direction tête-pieds de la géométrie de l'accélérateur utilisée pour les simulations.

La modélisation de la tête débute par la cible de conversion, sur laquelle des électrons de 6 MeV interagissent pour créer le faisceau de photons. Ces derniers débutent leur mise en forme par le collimateur primaire, puis traversent ensuite le cône égalisateur, une chambre moniteur, le collimateur multilame Agility™ avant de terminer par les mâchoires, elles-mêmes suivies de plaques d'acier qui ferment la tête de l'accélérateur. Le faisceau est émis vers une cuve à eau en PMMA représentée ci-après sur la figure 91.

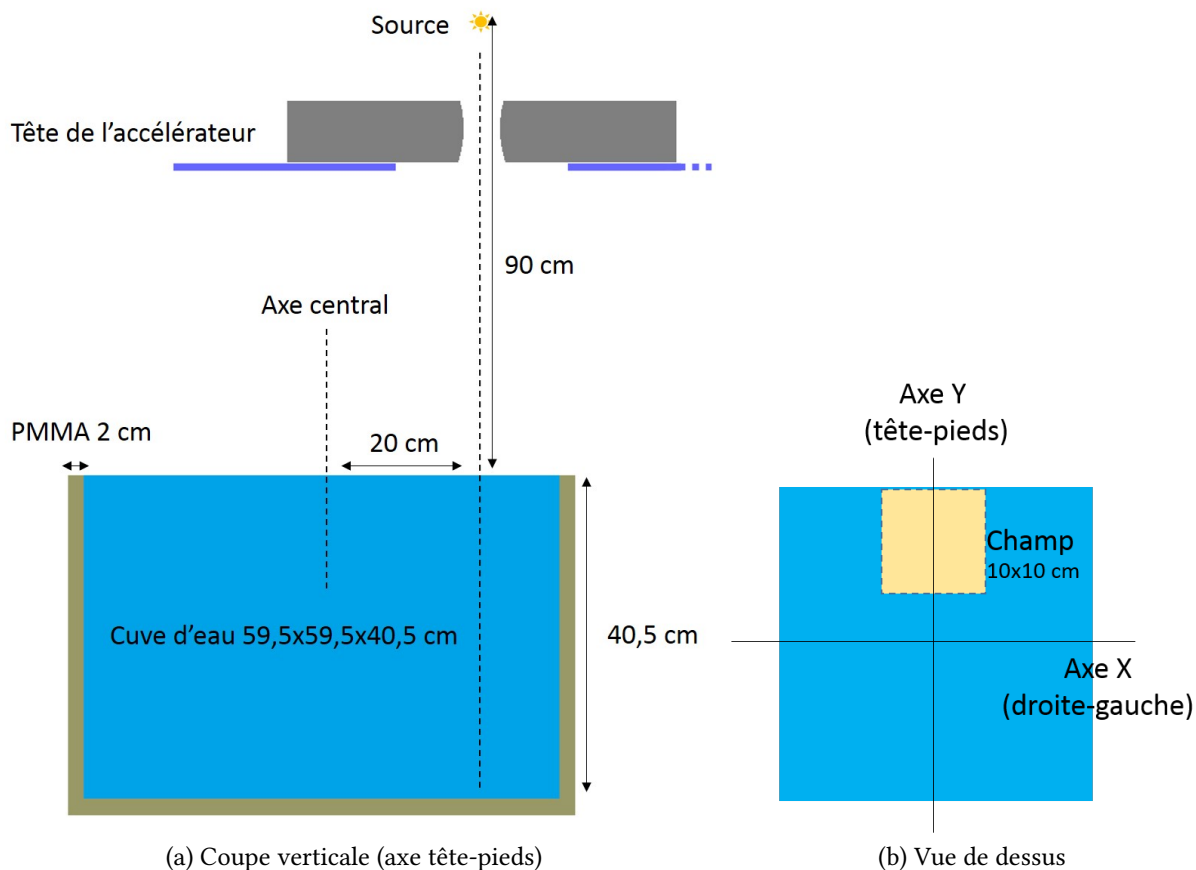


FIGURE 91 – Représentation de la géométrie de la cuve à eau utilisée pour les simulations et de sa position relative à l'accélérateur en coupe verticale en (a), et en coupe horizontale à la profondeur de référence en (b).

La cuve mesure $59,5 \times 59,5 \times 40,5 \text{ cm}^3$, et chaque face à l'exception de la face supérieure est limitée par une épaisseur de 2 cm de PMMA. L'axe central de la cuve est décalé de 20 cm dans la direction Y (voir figure 91) par rapport à l'axe du faisceau, et la surface de l'eau est placée à 90 cm de la cible de conversion.

L'estimation des doses hors-champ et la simulation de faisceaux de photons produits à partir d'électrons étant toutes deux coûteuses en temps, la simulation est accélérée en enregistrant préalablement les photons à leur sortie de la cible de conversion pour former un fichier PSF (voir section 5.2.3) correspondant à 6 milliards d'électrons primaires (pour une taille de 600 Go). Ce fichier est ensuite réutilisé 10 fois pour chaque simulation.

Avant de réaliser les mesures, afin de s'assurer que la chambre d'ionisation choisie peut être utilisée pour des mesures hors-champ, une estimation du spectre en énergie des photons est effectuée à 45 cm de l'axe du faisceau, à 30 cm de profondeur (c'est à dire dans les régions les plus éloignées où les mesures pourront être réalisées). Le spectre est estimé dans une sphère de 3 cm de rayon, sur 400 intervalles entre 0 et 6,5 MeV. À défaut de pouvoir utiliser la simulation analogique, qui demande un temps de calcul bien trop important, la simulation utilise le transport pseudo-déterministe avec une sphère superposée à celle dans laquelle le spectre est estimé. Le résultat, obtenu à l'aide d'une simulation de 3 heures sur 160 processeurs, est donné ci-dessous sur la figure 92.

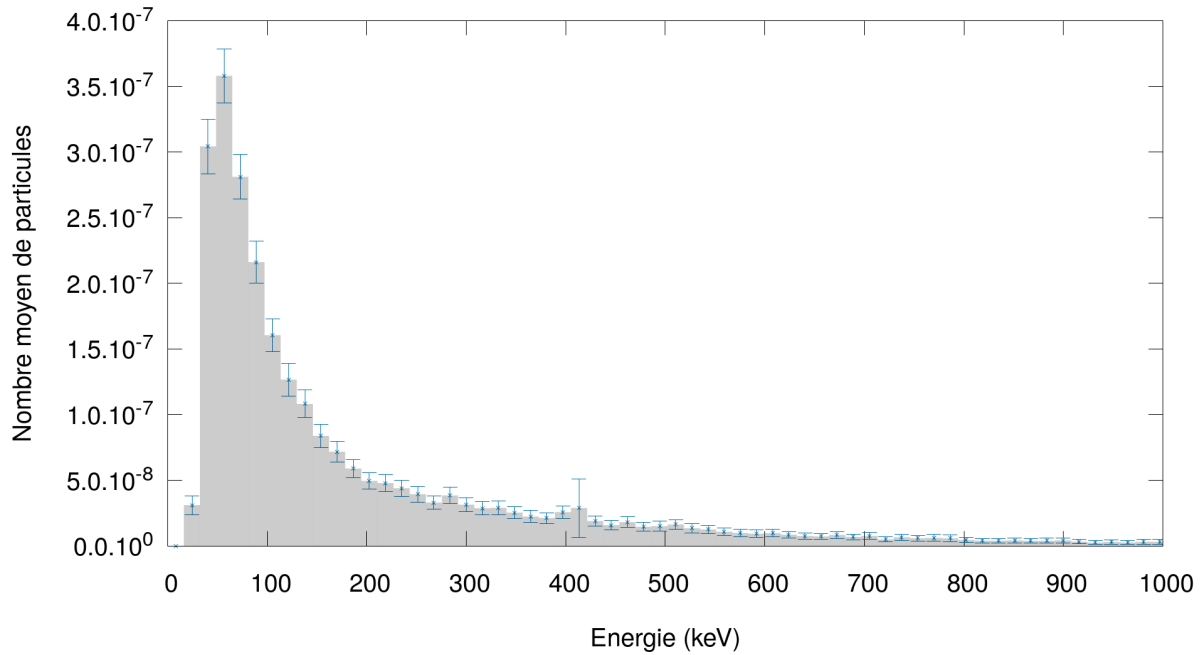


FIGURE 92 – Spectre en énergie des photons estimé par simulation dans une sphère de 3 cm de rayon placée à 45 cm de l’axe du faisceau et à 30 cm de profondeur dans la cuve à eau de la figure 91.

Le maximum du spectre se trouve autour de 57 keV et l’énergie moyenne est située à 226 keV. La chambre devrait donc bien se trouver dans ses conditions d’utilisation nominales, et nous avons vu en 2.3.1 que l’électrode en aluminium permet alors des mesures hors-champ sans correction.

8.3.3 Mesure des profils de dose

Une série de mesures est réalisée selon l’axe Y de la figure 91, entre l’axe du faisceau et le bord le plus éloigné de la cuve, pour obtenir un premier profil de dose à une profondeur de 5 cm. Les mesures sont ensuite répétées pour les profondeurs de 10 cm, 20 cm et 30 cm. Les profils ainsi obtenus sont donnés sur la figure 93. Chaque profil est normalisé par rapport à la dose obtenue à 10 cm de profondeur dans l’axe du faisceau. L’incertitude sur les valeurs données par la chambre est de 1,1 %, et ne sera donc pas représentée sur les figures par la suite.

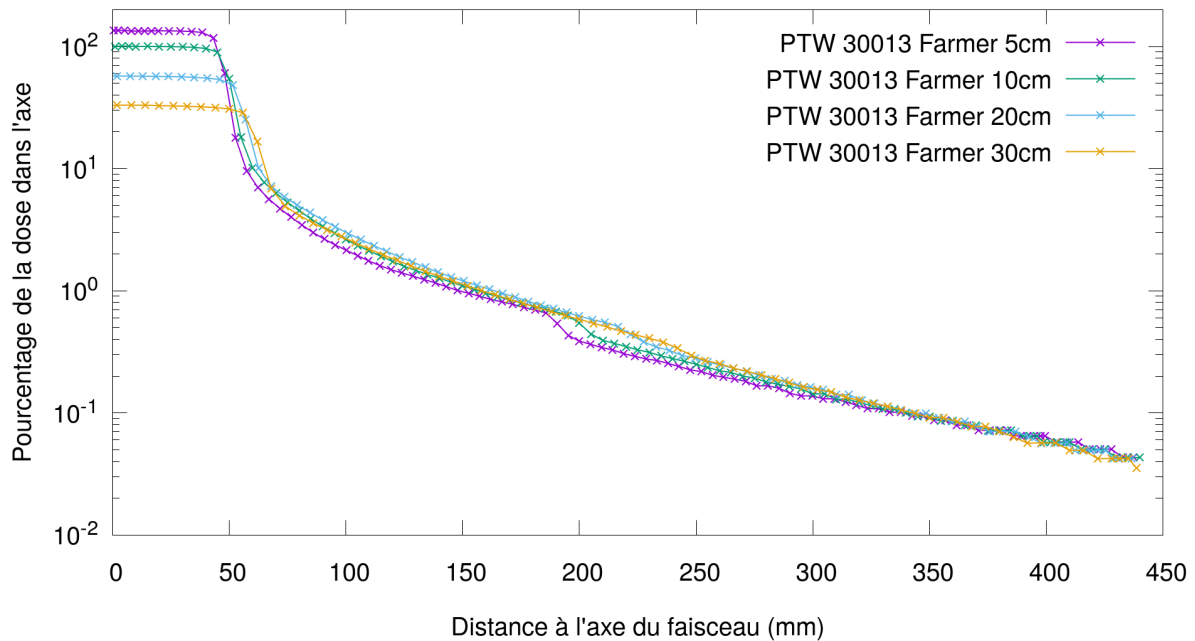


FIGURE 93 – Profils de dose mesurés à 5, 10, 20 et 30 cm de profondeur dans la cuve à eau à l’aide de la chambre d’ionisation PTW 30013 Farmer, selon l’axe Y de la figure 91 dans la configuration décrite en 8.3.1.

On retrouve sur ces profils la décroissance exponentielle de la dose avec la distance au faisceau quelle que soit la profondeur. On peut également observer un décrochage autour de 20 cm, dont l’amplitude diminue avec la profondeur. Ce dernier se décale également vers l’extérieur lorsque la profondeur augmente, ce qui laisse penser qu’il peut être dû à un obstacle sur le trajet des photons diffusés dans la tête.

Des mesures selon l’axe X de la figure 91 sont également réalisées. Afin d’éviter de replacer la cuve (qui doit être décalée de 20 cm sur l’axe de mesure), la tête de l’accélérateur subit simplement une rotation de 90°, et les mesures sont à nouveau réalisées sur l’axe Y. Cette configuration permet d’obtenir des mesures équivalentes à celles qui pourraient être faites selon l’axe X sans rotation de la tête. Les profils obtenus, à nouveau normalisés par rapport à la dose mesurée à 10 cm de profondeur dans l’axe du faisceau, sont donnés sur la figure 94.

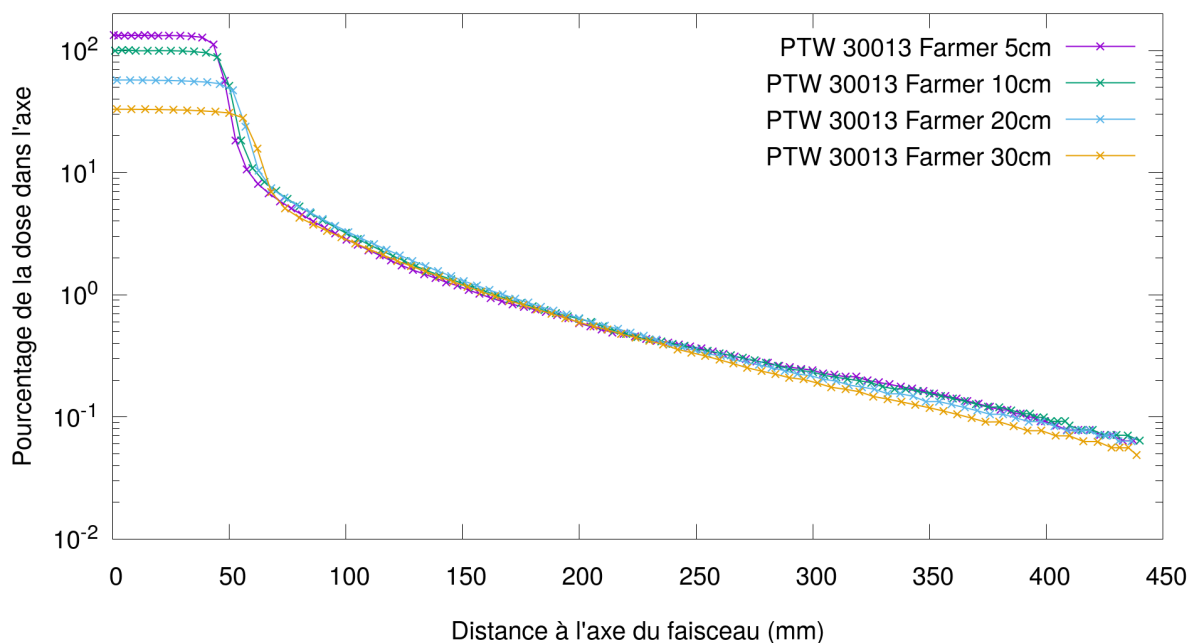


FIGURE 94 – Profils de dose mesurés à 5, 10, 20 et 30 cm de profondeur dans la cuve à eau à l’aide de la chambre d’ionisation PTW 30013 Farmer, selon l’axe X dans la configuration décrite en 8.3.1, avec rotation de 90 degrés de la tête de l’accélérateur.

Les profils mesurés selon l’axe X présentent une forme similaire à ceux obtenus pour l’axe Y. En revanche, la diminution soudaine observée précédemment est ici absente, ce qui confirme donc l’hypothèse d’un élément de la tête qui ne serait pas présent dans cette direction.

Avant d’estimer les profils présentés ci-dessus à l’aide du modèle d’accélérateur décrit en 8.3.2, une rapide étape de simulation permet d’étudier qualitativement la provenance des rayonnements hors-champ.

8.3.4 Visualisation de l’origine des particules hors-champ

Cette première étude qualitative vise à déterminer l’origine des particules formant la dose hors-champ en deux points particuliers de la cuve à eau : en profondeur à proximité du faisceau, où on s’attend à une contribution majoritaire des diffusions dans l’eau la cuve, et en surface à distance du faisceau où les fuites de l’accélérateur devraient gagner en importance. Pour cela, le calcul de la carte d’importance implémentée avec le transport pseudo-déterministe (décrit en 6.4) est utilisé en partie. Une sphère pseudo-déterministe de rayon 2,5 cm est placée à deux positions dans la configuration de calcul décrite précédemment, et, pour chaque position, la carte d’importance associée est calculée. L’estimation de la carte passe par le calcul du poids total apporté à la sphère par les particules déterministes créées dans chaque voxel : cette carte intermédiaire renseigne ainsi sur l’origine de la dose déposée dans la sphère. La carte utilisée est une grille de $1000 \times 1000 \times 1000$ voxels, estimée à partir des 10^6 premières particules déterministes créées. La sphère se trouve dans un premier temps à 30 cm de profondeur et à 15 cm de l’axe du faisceau. Le résultat est donné ci-après sur la figure 95.

Contribution en poids

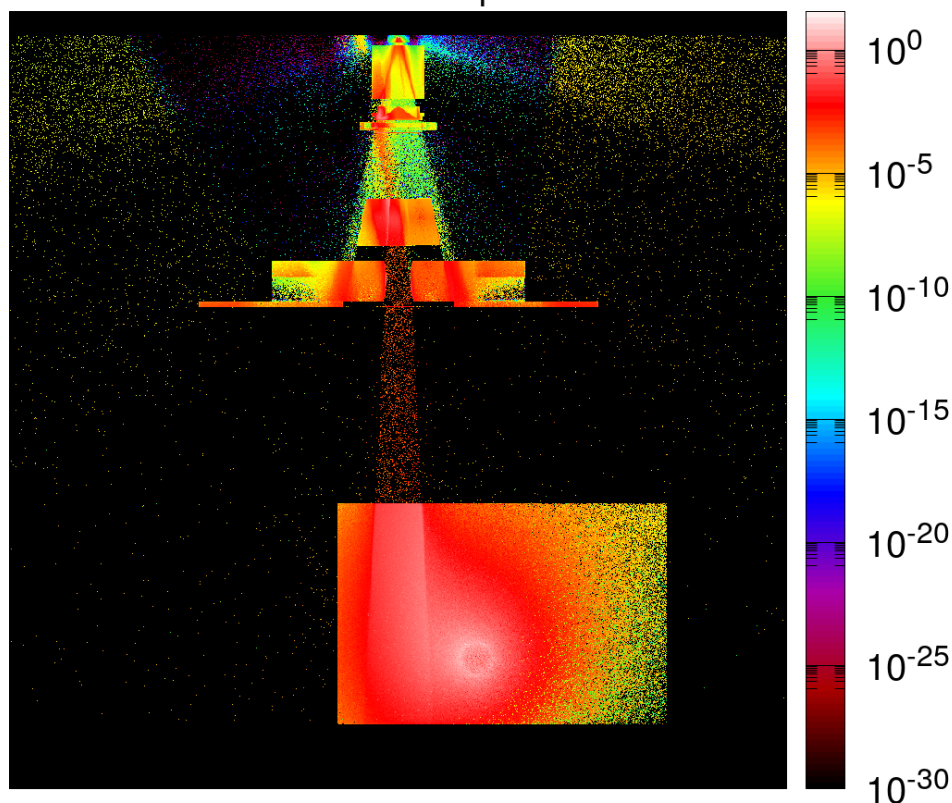


FIGURE 95 – Carte des contributions en poids de chaque voxel (sommés selon l’axe avant-arrière d’une grille de $1000 \times 1000 \times 1000$ voxels) dans la configuration décrite en 8.3.1, pour une sphère placée à 15 cm de l’axe du faisceau et 30 cm de profondeur dans la cuve.

Hormis les photons diffusant à proximité immédiate de la sphère, la contribution principale se trouve à l’intérieur de la cuve à eau, dans la trajectoire du faisceau. Ce résultat est en accord avec ceux provenant de la littérature, cités en 2.2.1 : en profondeur, la dose hors-champ provient principalement des diffusions dans le patient (ici, la cuve à eau). On peut tout de même observer une contribution importante du côté gauche du MLC et du cône égalisateur, à partir desquels les photons diffusés peuvent atteindre la sphère sans avoir à traverser les mâchoires.

La figure 96, ci-dessous, représente à nouveau le poids total amené à la sphère, mais cette fois lorsque celle-ci se trouve à 45 cm de l’axe du faisceau et à 5 cm de profondeur.

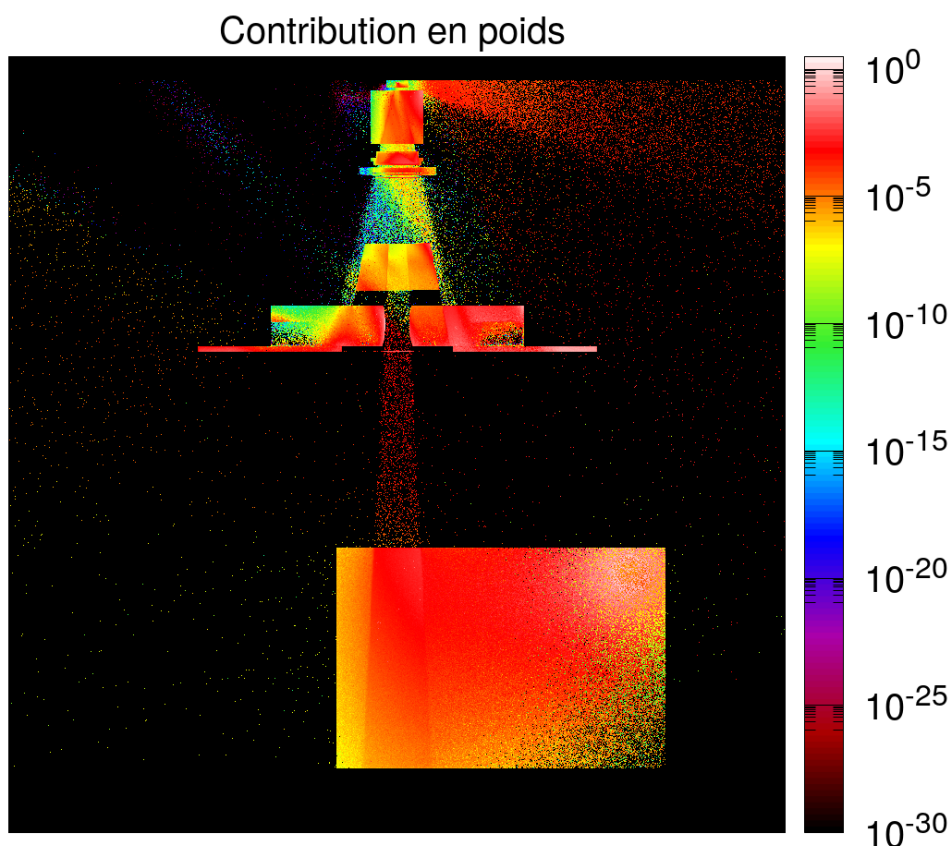


FIGURE 96 – Carte des contributions en poids de chaque voxel (sommés selon l’axe avant-arrière d’une grille de $1000 \times 1000 \times 1000$ voxels) dans la configuration décrite en 8.3.1, pour une sphère placée à 45 cm de l’axe du faisceau et 5 cm de profondeur dans la cuve.

Dans ce dernier cas, la contribution de la région traversée par le faisceau utile est bien moindre. L’extrémité droite de la plaque d’acier située au plus bas de la tête de l’accélérateur est ici la source de dose la plus importante, suivie de la surface des mâchoires de gauche. À nouveau, on peut constater que les photons diffusés sur cette partie des mâchoires peuvent atteindre la sphère sans obstacle, et contribuent donc de manière importante à la dose hors-champ à droite du faisceau. En plaçant la sphère à l’extrémité droite de la plaque d’acier, on s’aperçoit notamment que les photons diffusant dans cette dernière proviennent eux-mêmes majoritairement des diffusions ayant lieu d’abord dans le cône égalisateur. Ces résultats sont à nouveau en accord avec la littérature, qui indique qu’à distance du champ et en particulier en surface, la dose provient en plus grande partie des diffusions et des fuites dans la tête de l’accélérateur.

8.3.5 Estimation d’un profil de dose et ajustement de la géométrie

Configuration par défaut

On estime ici par simulation, à l’aide de la configuration décrite en 8.3.1, le profil de dose selon l’axe Y (perpendiculaire aux lames du MLC) à 5 cm de profondeur dans la cuve à eau.

Chaque profil mesuré ou simulé par la suite est normalisé par rapport à la dose moyenne

obtenue dans le faisceau à 10 cm de profondeur¹⁵. Lorsque le transport pseudo-déterministe est utilisé, une sphère de 20 cm de rayon sans sphère interne est placée à 25 cm de l'axe du faisceau. La carte d'importance est constituée de 30×30×30 voxels, couvrant la géométrie de calcul jusqu'aux limites de la tête de l'accélérateur et de la cuve. Elle est calculée à partir des 10 000 premiers photons déterministes. Chaque simulation est réalisée à l'aide de 160 processeurs, en dupliquant 10 fois le PSF mentionné en 8.3.1, pour une durée approximative de 5 heures. La durée est équivalente que le transport pseudo-déterministe soit utilisé ou non.

Le résultat obtenu avec et sans le transport pseudo-déterministe est présenté ci-dessous sur la figure 97, sur laquelle il est comparé au profil mesuré à 5 cm. Pour la lisibilité des graphes, les barres d'erreur sur les valeurs estimées sont représentées par une coloration au-dessus et en dessous de chaque valeur de dose.

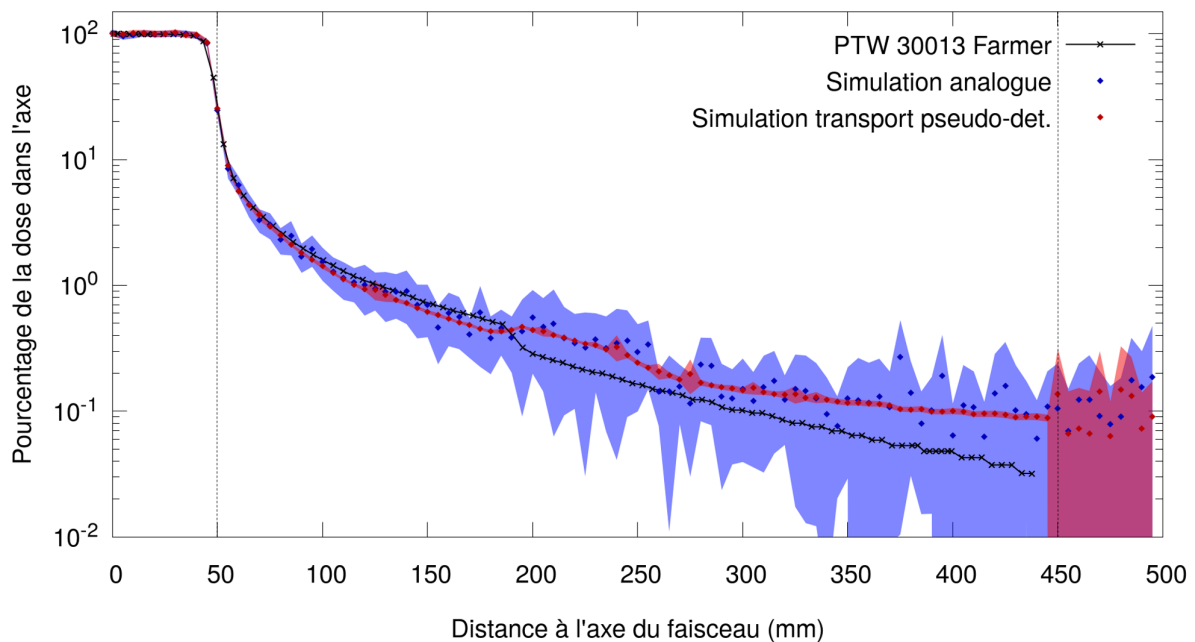


FIGURE 97 – Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur par défaut, comparés au profil mesuré. Les limites de la sphère sont représentées en pointillés.

On constate que la dose simulée est inférieure à celle obtenue par mesures jusqu'à environ 18 cm de l'axe du faisceau, puis est supérieure. L'écart augmente ensuite avec la distance pour les deux profils simulés, et reste visible sur le profil analogue malgré l'importante incertitude sur ce dernier. Sur le spectre simulé avec le transport pseudo-déterministe, on peut également noter quelques points pour lesquels la dose est plus élevée, semblant s'éloigner de la tendance générale, mais pour lesquels l'incertitude est élevée : il s'agit de points pour lesquels des sauts de variance ont eu lieu (ici relativement légers). Leur emplacement diffère d'une simulation à l'autre, comme on peut le voir sur les figures 102 à 122.

15. La moyenne est réalisée sur les doses obtenues sur l'intervalle entre -4 cm et 4 cm du centre du faisceau. Elle est utilisée pour limiter l'effet des fluctuations statistiques éventuellement observées lors des simulations lorsqu'un seul point est utilisé pour la normalisation.

La différence la plus notable est au niveau de la soudaine diminution de la dose, visible sur le profil mesuré autour de 18 cm. Les deux profils simulés semblent, à l'inverse, présenter une augmentation de la dose à cet emplacement. Cette différence pourrait être due à un élément de la tête de l'accélérateur qui serait mal modélisé ou serait absent de la géométrie simulée.

La figure 98 ci-dessous présente l'écart relatif entre les simulations avec et sans transport pseudo-déterministe et les doses mesurées en fonction de la distance à l'axe du faisceau. Les emplacements de la chambre pour les mesures étant différents des positions où la dose est estimée pour obtenir le profil (et notamment moins nombreux), la différence est obtenue en considérant une interpolation linéaire entre les valeurs mesurées. Chaque dose simulée est ensuite comparée à la valeur mesurée obtenue par interpolation pour sa position respective.

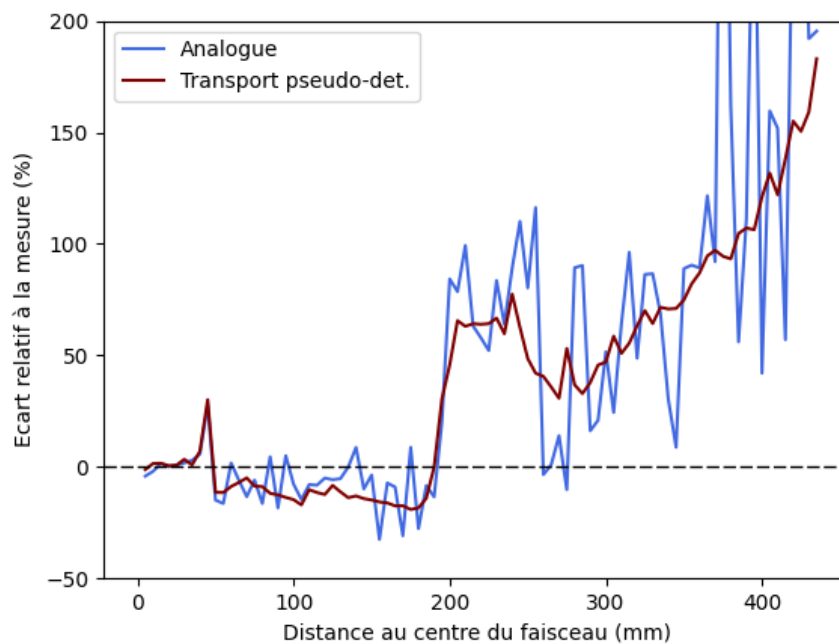


FIGURE 98 – Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur par défaut.

Les écarts obtenus permettent de mettre davantage en évidence les différentes régions observées précédemment : la dose est sous-estimée à proximité du faisceau (5 à 20 cm), la tendance s'inverse rapidement à partir de 20 cm, puis l'écart tend à croître avec la distance. Le pic observé autour de 5 cm interpelle, puisqu'il se retrouve à la fois sur la dose obtenue en simulation analogue et sur celle obtenue avec le transport pseudo-déterministe. Toutefois, sa position correspond exactement à la pénombre du faisceau où la dose diminue très rapidement de plusieurs ordres de grandeur. L'interpolation entre les doses mesurées étant ici linéaire, on peut s'attendre à ce type d'erreur, qui serait donc davantage due au calcul des écarts plutôt qu'à la simulation.

Ajout de blocs de plomb autour du MLC

La position de la diminution observée sur le profil mesuré de la figure 97 correspond à l'angle d'émission où s'arrête le MLC, tout en étant encore inférieur à l'angle d'ouverture du collimateur primaire, permettant ainsi aux photons émis sur cet intervalle angulaire de ne rencontrer que les mâchoires lors de leur trajet vers la sphère. Cet effet géométrique est illustré ci-dessous sur la figure 99.

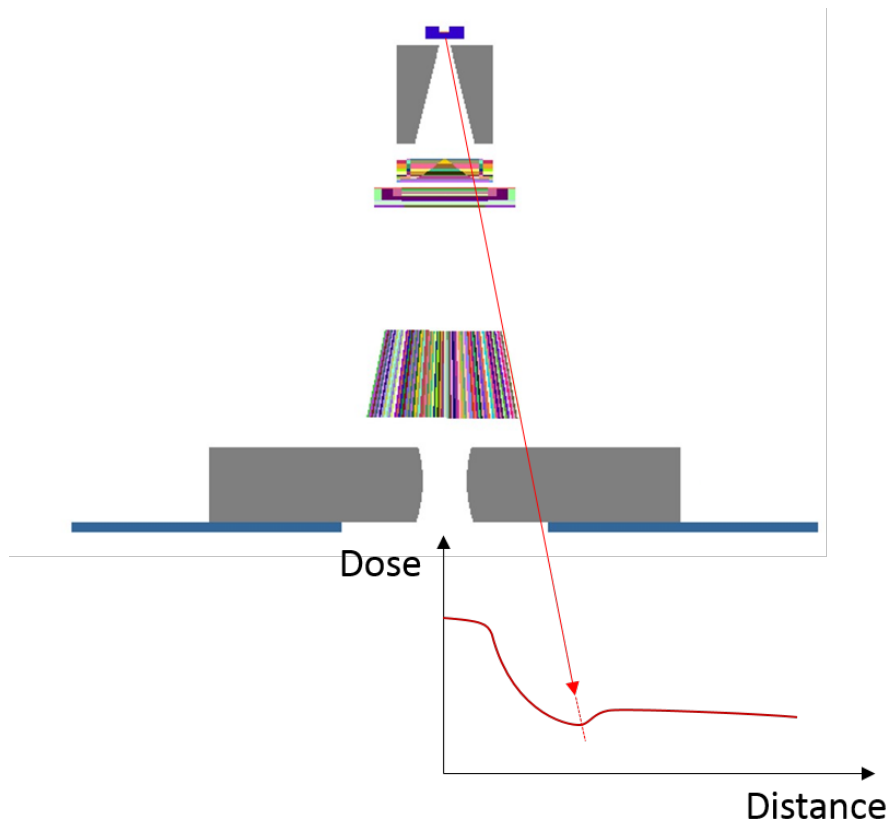


FIGURE 99 – Illustration de l'effet géométrique influant potentiellement sur le profil de dose lorsque le MLC n'est plus traversé par les photons.

Il semble qu'un ou plusieurs éléments de la tête permettent en réalité d'arrêter une partie de ces photons. Alors que l'habillage de plastique du bras de l'accélérateur était retiré lors d'une maintenance, nous avons pu constater que le MLC est inséré entre deux blocs de plomb durci à l'antimoine $PbSb_4$, d'une épaisseur d'environ 2 cm et parallèles aux lames extérieures. Ces blocs sont visibles sur la photo présentée en figure 100.

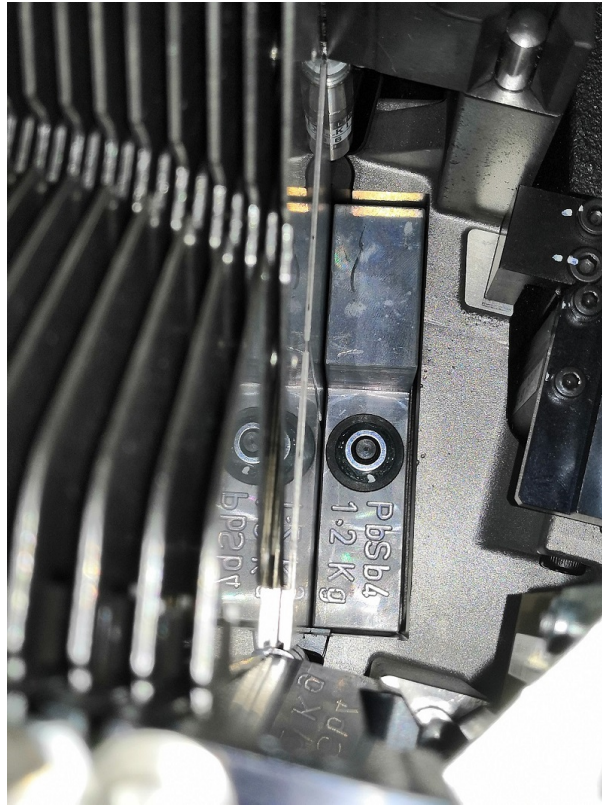


FIGURE 100 – Bloc de PbSb_4 accolé au MLC.

Des blocs de plomb d'épaisseur 2 cm ont alors été ajoutés à la géométrie utilisée pour la simulation, de chaque côté du MLC, de manière à reproduire l'effet des blocs de PbSb_4 . La nouvelle configuration utilisée est représentée ci-dessous sur la figure 101.

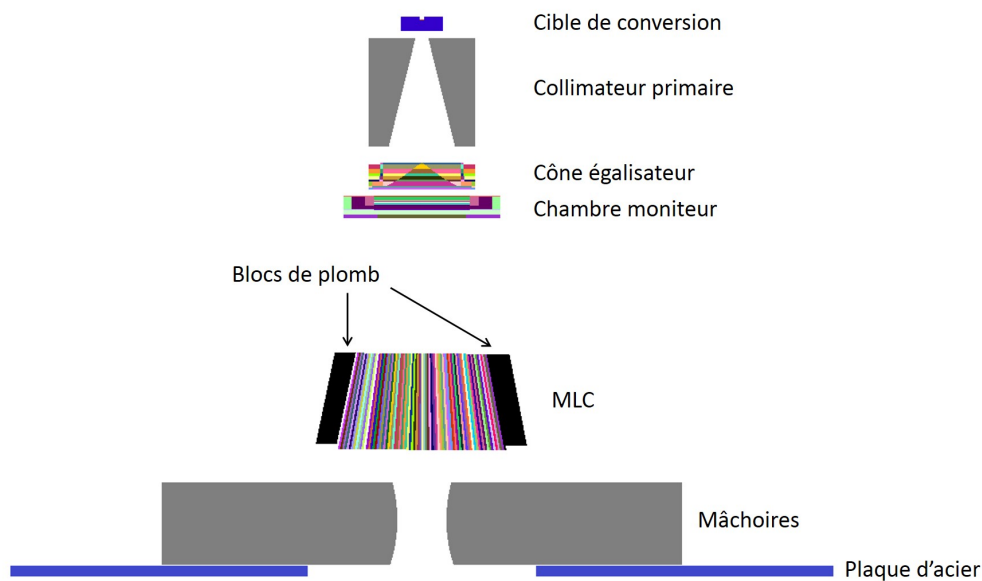


FIGURE 101 – Représentation de la géométrie utilisée pour la simulation après l’ajout de blocs de plomb (en noir) de chaque côté du MLC, destinés à reproduire l’effet des blocs de $PbSb_4$ présents en réalité (figure 100).

Le profil de dose est à nouveau estimé avec et sans le transport pseudo-déterministe. Le résultat est présenté ci-dessous, avec le profil mesuré, sur la figure 102.

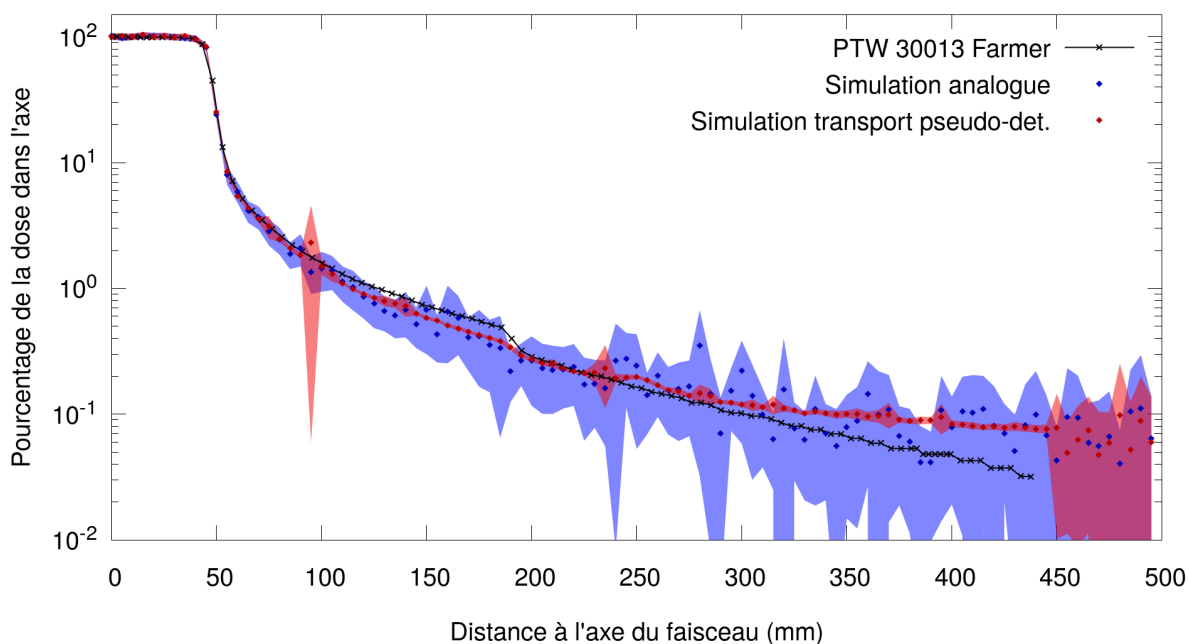


FIGURE 102 – Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, comparés au profil mesuré.

Les profils simulés présentent, cette fois, eux aussi une diminution soudaine au même

emplacement que pour le profil mesuré. L'ajout des blocs de plomb semble ainsi corriger la dose entre 18 et 23 cm. Cette diminution disparaît toutefois à plus grande distance, lorsque l'angle d'émission des photons est suffisant pour dépasser les blocs ajoutés au MLC. De plus, la dose simulée reste inférieure à celle mesurée à proximité du faisceau.

Cet effet peut être vérifié sur la figure 103 ci-après, qui présente les écarts entre les doses simulées et les doses mesurées en fonction de la distance à l'axe du faisceau après l'ajout des blocs de plomb. Les écarts sont obtenus de la même manière que pour la figure 98.

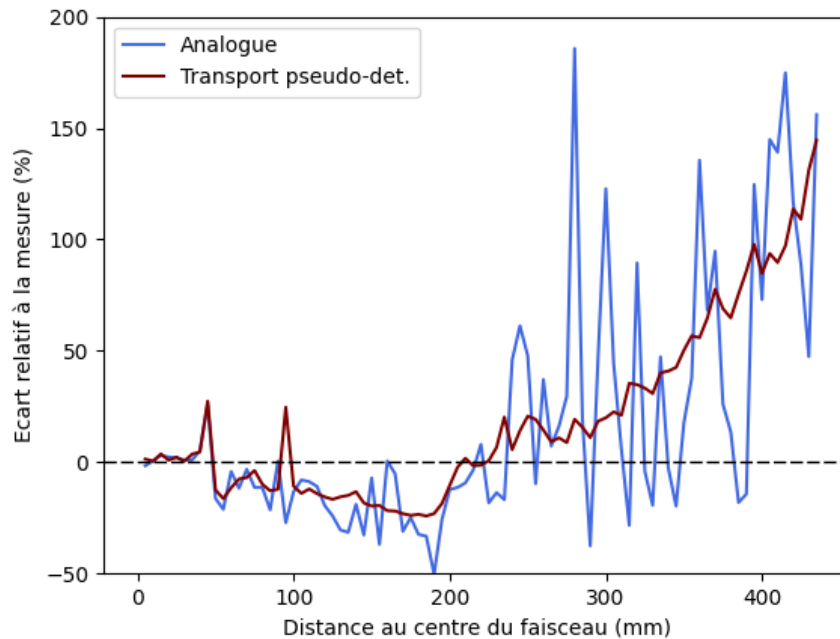


FIGURE 103 – Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb.

La région dans laquelle la dose était surestimée, entre 20 et environ 23 cm, présente maintenant un écart de l'ordre de 10 % avec les doses mesurées. Cette écart augmente tout de même avec la distance, et semble être dans la continuation de l'écart constaté à plus grande distance du faisceau, ce qui indique que son origine est probablement similaire. On notera que le pic observé à 10 cm correspond au saut de variance visible sur la figure 102.

Écartement des lames supérieures et inférieures du MLC

L'hypothèse alors émise est que cette différence à proximité du champ est due en partie à l'écartement des lames situées aux extrémités du MLC sous les mâchoires, qui ne sont pas utilisées pour former un champ $10 \times 10 \text{ cm}^2$. Dans cette configuration, l'espace minimal entre les lames situées sous les mâchoires était supposé d'un millimètre, étant rangées en position « fermée » (voir figure 104 (a) ci-après). En observant la représentation du MLC sur le pupitre de commande de l'accélérateur, l'écart semble plutôt être proche de 2 cm (figure 104 (b)). Cette

légère ouverture pourrait être un choix du constructeur, permettant une modification plus rapide du champ en gardant les lames non utilisées dans une position intermédiaire. Bien que cette différence n'ait aucun impact dans le champ, cet écart pourrait permettre à davantage de photons diffusés d'atteindre des régions hors-champ.

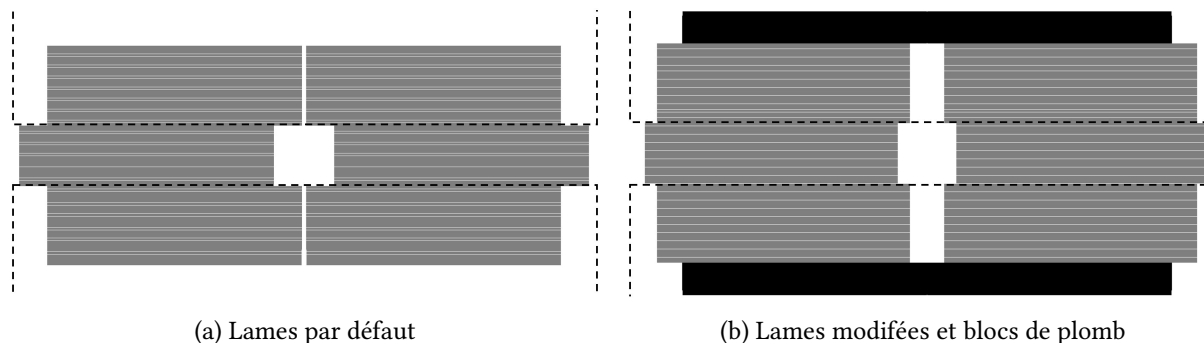


FIGURE 104 – Représentation d'une coupe horizontale du MLC dans la géométrie par défaut de l'accélérateur en (a), et après ajout des blocs de plomb et décalage des lames situées hors du champ en (b). Les mâchoires, situées sous le MLC, sont représentées en pointillés. L'axe des profils réalisés est ici l'axe haut-bas.

Après modification des lames extérieures du MLC pour correspondre à la figure 104 (b), le profil de dose est à nouveau estimé avec et sans le transport pseudo-déterministe. Le résultat, comparé au profil mesuré, est donné ci-dessous sur la figure 105.

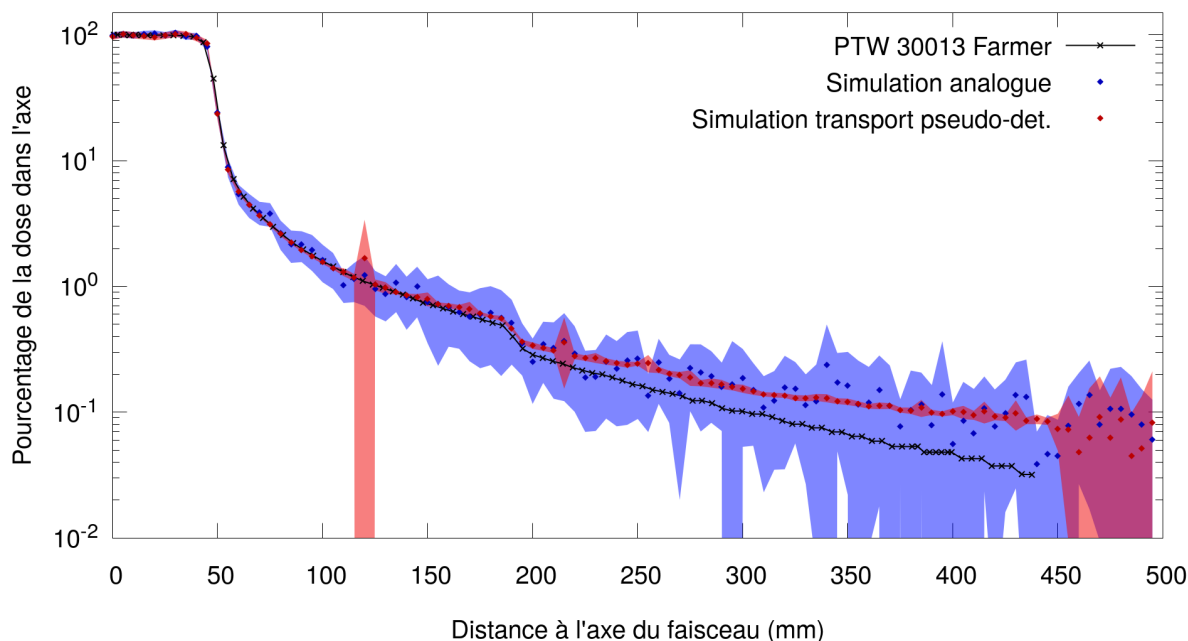


FIGURE 105 – Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb et un décalage des lames situées en dehors du champ, comparés au profil mesuré.

La dose à proximité du champ (jusqu'à la diminution observée à 18 cm) n'est plus sous-estimée et se rapproche davantage de la dose mesurée. Elle semble même légèrement supérieure à cette dernière, tout comme la dose estimée loin du faisceau pour laquelle l'écart avec la mesure continue de croître avec la distance.

La figure 106 ci-après présente les écarts entre les doses simulées et les doses mesurées en fonction de la distance à l'axe du faisceau après la correction des lames. Les écarts sont obtenus de la même manière que pour la figure 98.

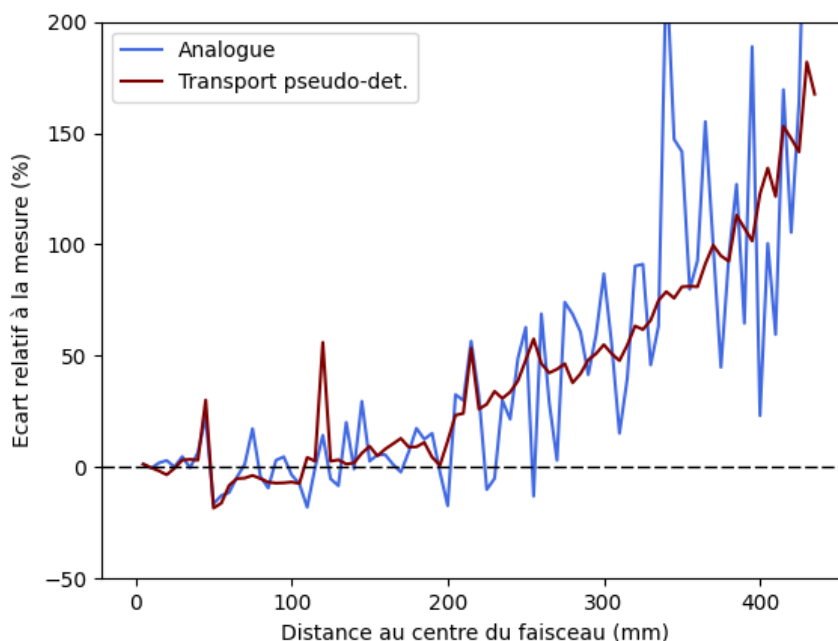


FIGURE 106 – Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb et pour laquelle l'écart entre les lames du MLC est corrigé.

Cette fois-ci, la seule tendance visible est une augmentation progressive de l'écart sur la dose, qui s'accélère avec la distance.

Ajout d'une protection d'acier autour de la tête

Une dernière hypothèse introduite ici consiste à supposer que la surestimation de la dose observée tout le long du profil provient soit de l'absence de nombreux éléments atténuants à l'intérieur de la tête (électronique, supports métalliques, moteurs...), soit de l'absence d'un ou plusieurs blindages dont la position est inconnue, soit d'une combinaison des deux.

On peut constater sur la figure 96 qu'une partie importante du poids arrivant à la sphère, lorsqu'elle est placée loin du champ, provient des diffusions dans la plaque d'acier située au plus bas de la tête de l'accélérateur. Les photons diffusant dans cette plaque proviennent eux-même en grande majorité des diffusions dans le cône égalisateur et dans la cible elle-même, après lesquels ils n'ont qu'une couche d'air à traverser avant d'atteindre la plaque. Il

est en réalité peu probable qu'autant de photons y parviennent sans être arrêtés par d'autres éléments de la tête, absents dans le modèle actuellement utilisé.

Afin de limiter les fuites et d'améliorer la prise en compte des éléments manquants de la tête, deux cylindres d'acier sont ajoutés à la modélisation de l'accélérateur : le premier, de rayon interne 7,4 cm (rayon de la chambre moniteur) et de rayon externe 20 cm, s'étend de la cible jusqu'au MLC. Le second, de rayons 10 cm et 20 cm, débute à la hauteur du MLC et se termine au niveau des mâchoires. La configuration obtenue est représentée sur la figure 107.

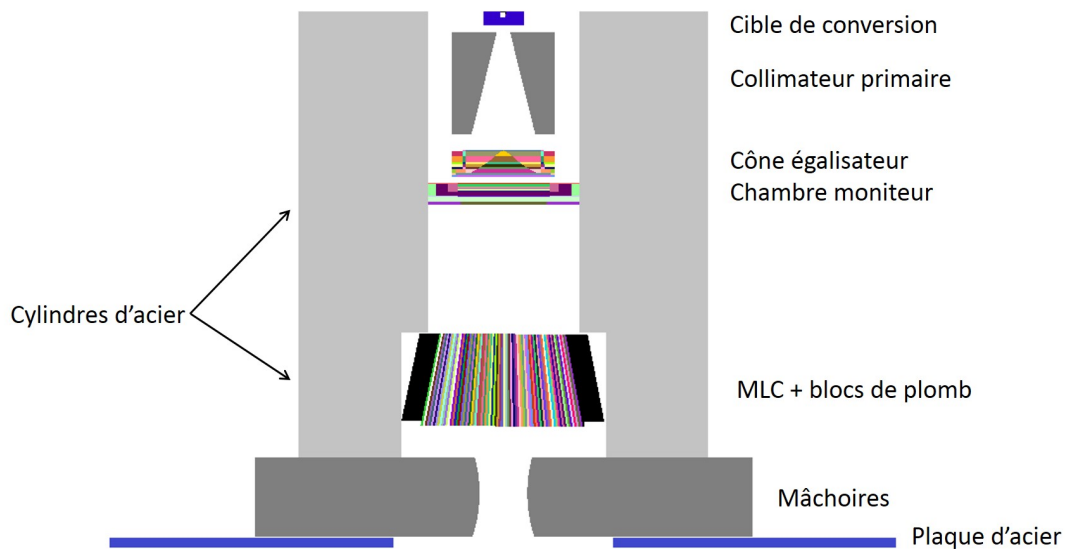


FIGURE 107 – Représentation de la géométrie utilisée pour la simulation après ajout des cylindres d'acier (en gris clair) entourant la majorité des éléments de la tête de l'accélérateur.

À nouveau, les profils sont estimés par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe pour cette nouvelle configuration. Les résultats sont comparés au profil mesuré sur la figure 108.

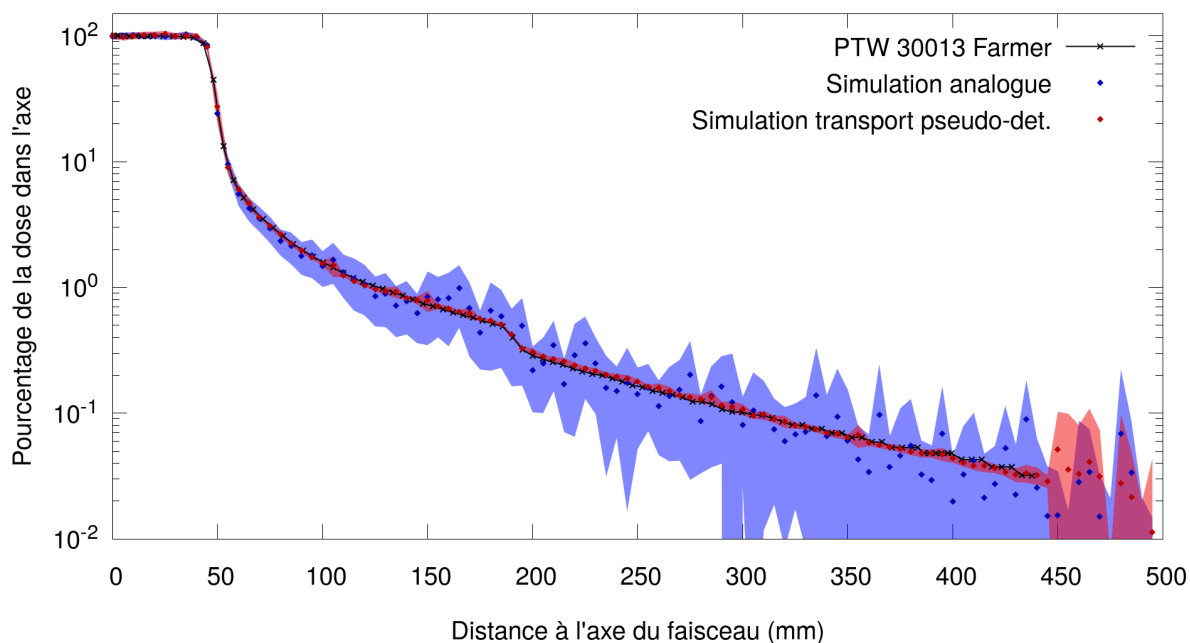


FIGURE 108 – Profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

Dans cette dernière simulation, la dose estimée avec l’utilisation du transport pseudo-déterministe est très proche de celle obtenue par mesures sur l’ensemble du profil, avec une très légère surestimation entre 20 et 30 cm qui pourrait être corrigée via l’ajout de protections supplémentaires autour de la tête. La forme du profil analogue, en revanche, reste très bruitée en raison de sa forte variance. En raison du temps nécessaire au calcul, il n’a pas été possible de réaliser un calcul analogue plus précis : même une simulation réalisée en utilisant 100 fois le PSF enregistré n’est pas suffisante pour obtenir une incertitude aussi faible que lorsque le transport pseudo-déterministe est employé, qui permettrait de voir sans ambiguïté les variations de la dose sur le profil. Au vu des résultats obtenus en 7.2.2, il est toutefois raisonnable de penser que la dose analogue serait à nouveau équivalente à la dose obtenue avec réduction de variance.

La figure 109 ci-après présente les écarts entre les doses simulées et les doses mesurées en fonction de la distance à l’axe du faisceau après ajout de la protection d’acier. Les écarts sont obtenus de la même manière que pour la figure 98.

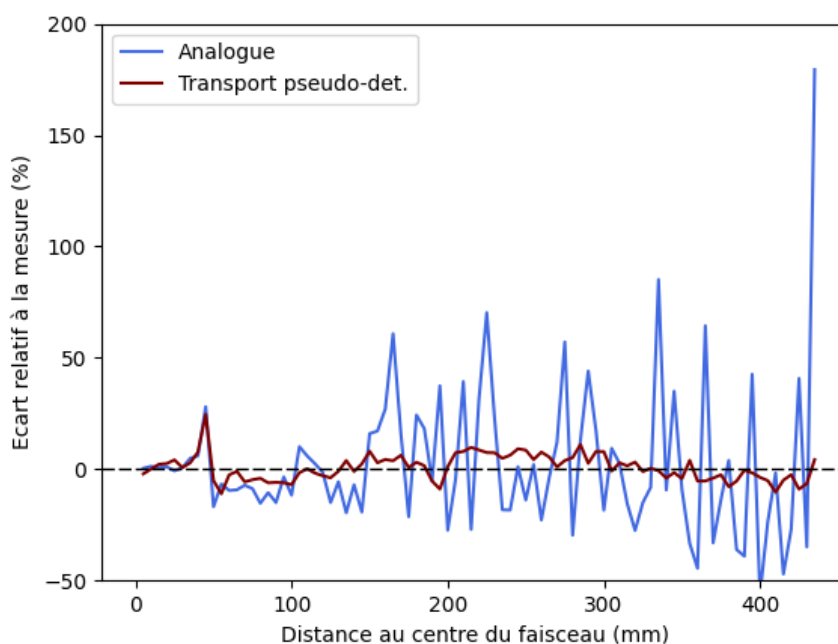


FIGURE 109 – Écart relatif à la mesure pour les profils de dose à 5 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, pour laquelle l'écart entre les lames du MLC est corrigé, et après l'ajout de la protection autour de la tête.

La dose semble encore légèrement surestimée aux alentours de 20 cm, et sous-estimée à plus grande distance et à proximité du faisceau. Il est possible que ces légères différences soient dues à la modélisation de la protection de plomb, qui approxime des éléments bien plus complexes ayant une influence sur le profil de dose. Quoiqu'il en soit, l'écart est ici très faible, avec une valeur maximale d'environ 10 % (en dehors du pic observé au niveau de la pénombre).

Enfin, dans ce cas-ci, l'utilisation du transport pseudo-déterministe permet de gagner en moyenne un facteur 249 sur l'efficacité pour les points contenus dans la sphère. Le calcul étant réalisé sur une durée de 5 heures, une simulation analogue équivalente demanderait donc plus de 50 jours à l'aide de 160 processeurs.

8.3.6 Profils en profondeur

À l'aide de ce modèle d'accélérateur, les profils mesurés à 10 cm, 20 cm et 30 cm de profondeur ont également été estimés par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe. Dans chaque cas, la sphère est déplacée à la profondeur à laquelle le profil est estimé. Les résultats sont donnés sur les figures 110 à 115 pour les profils obtenus et les écarts entre mesure et simulation.

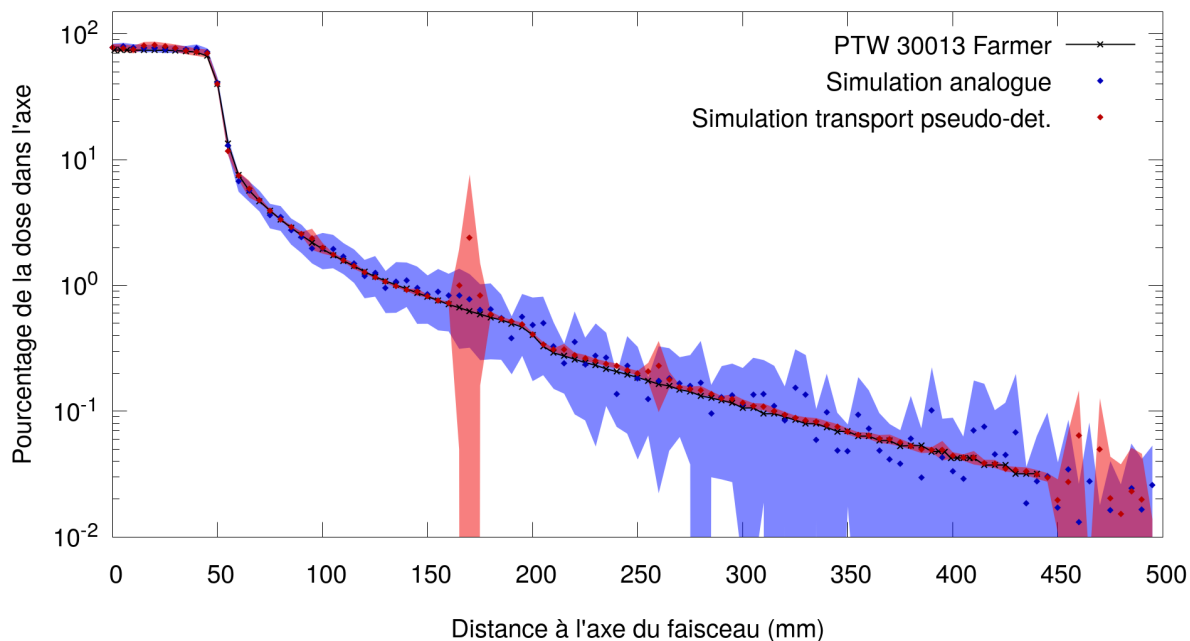


FIGURE 110 – Profils de dose à 10 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

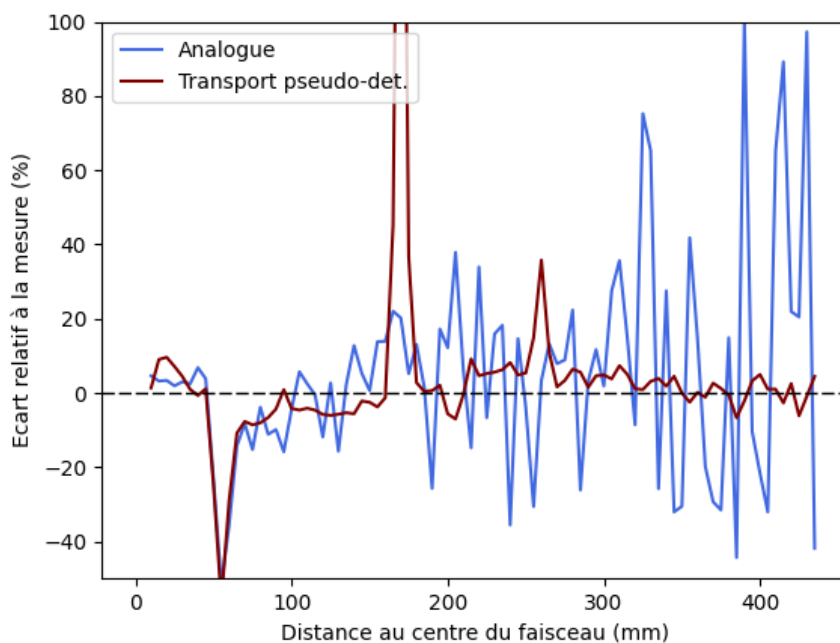


FIGURE 111 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 10 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.

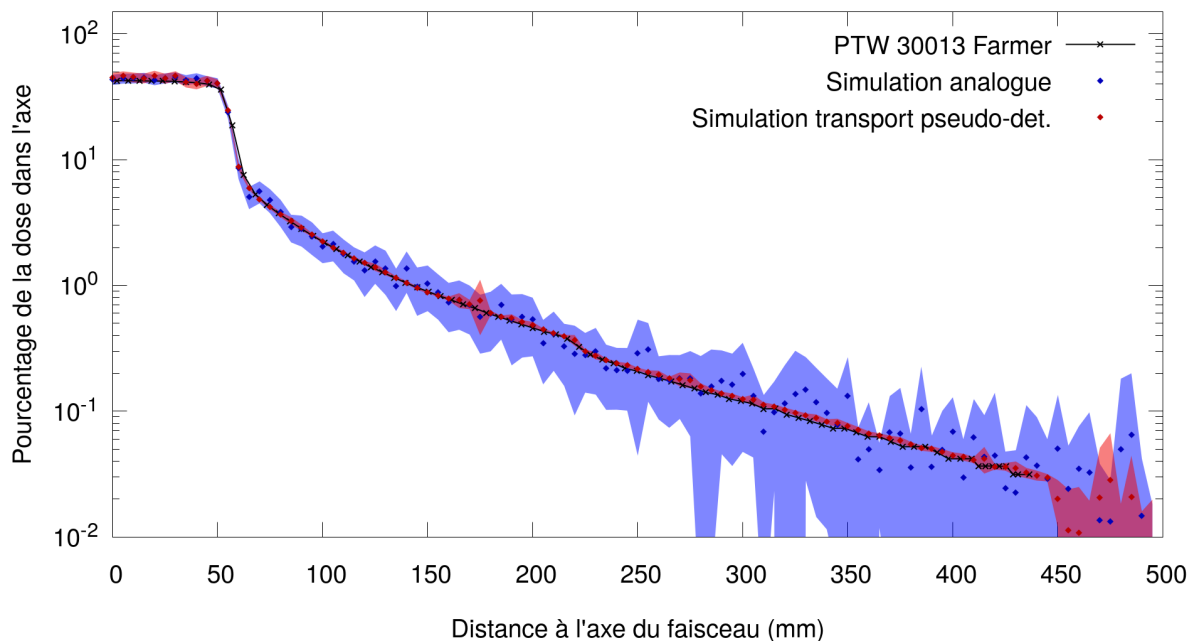


FIGURE 112 – Profils de dose à 20 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

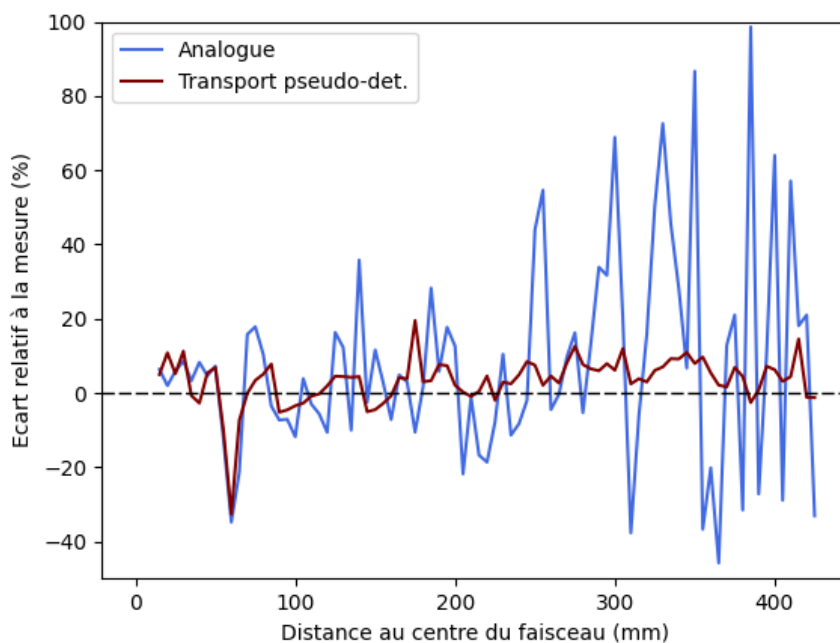


FIGURE 113 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 20 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête.

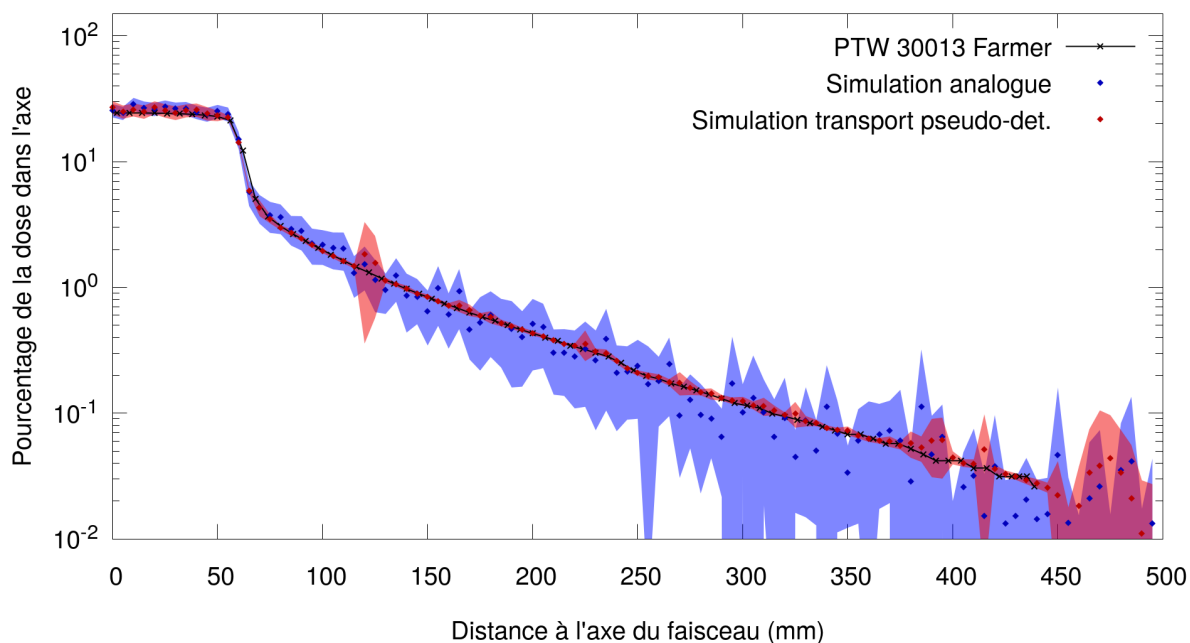


FIGURE 114 – Profils de dose à 30 cm de profondeur obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

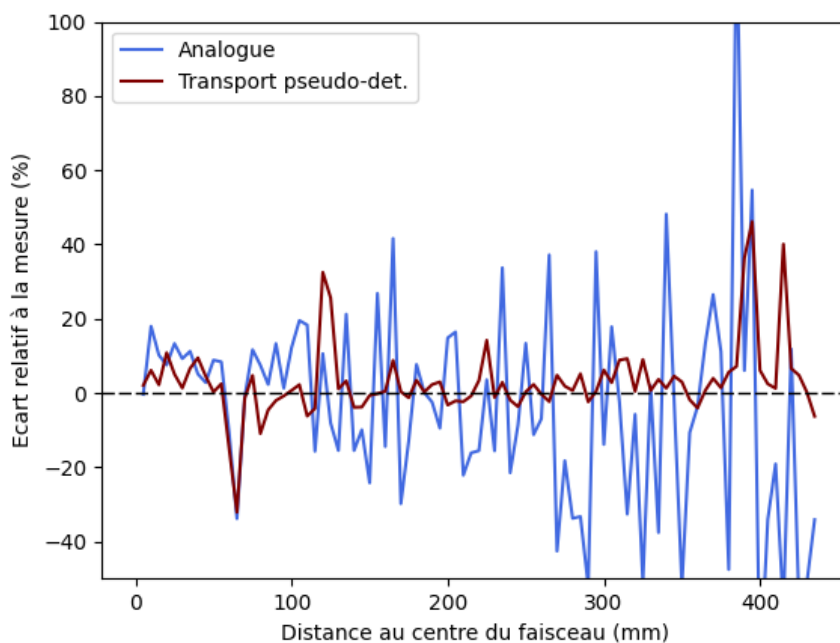


FIGURE 115 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 30 cm de profondeur, obtenus avec la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête.

La légère surestimation observée entre 20 et 30 cm de l'axe du faisceau tend à disparaître lorsque la profondeur augmente, jusqu'à être absente à 30 cm de profondeur (figure 114), si bien que l'écart avec la dose mesurée semble principalement fluctuer autour de zéro sur la figure 115 (à l'exception de sauts de variance, formant par ailleurs un important pic sur la figure 111). Cette observation confirme que cette différence provient des fuites de la tête de l'accélérateur, puisqu'elle disparaît lorsque la diffusion dans l'eau devient la source de dose majoritaire. Globalement, la forme du profil est très bien reproduite quelle que soit la profondeur.

8.3.7 Profils selon l'axe droite-gauche

Cette même configuration est finalement utilisée pour estimer les profils selon l'axe droite-gauche à chaque profondeur. Les résultats sont donnés ci-après sur les figures 116 à 123 pour les profils obtenus et les écarts par rapport aux mesures.

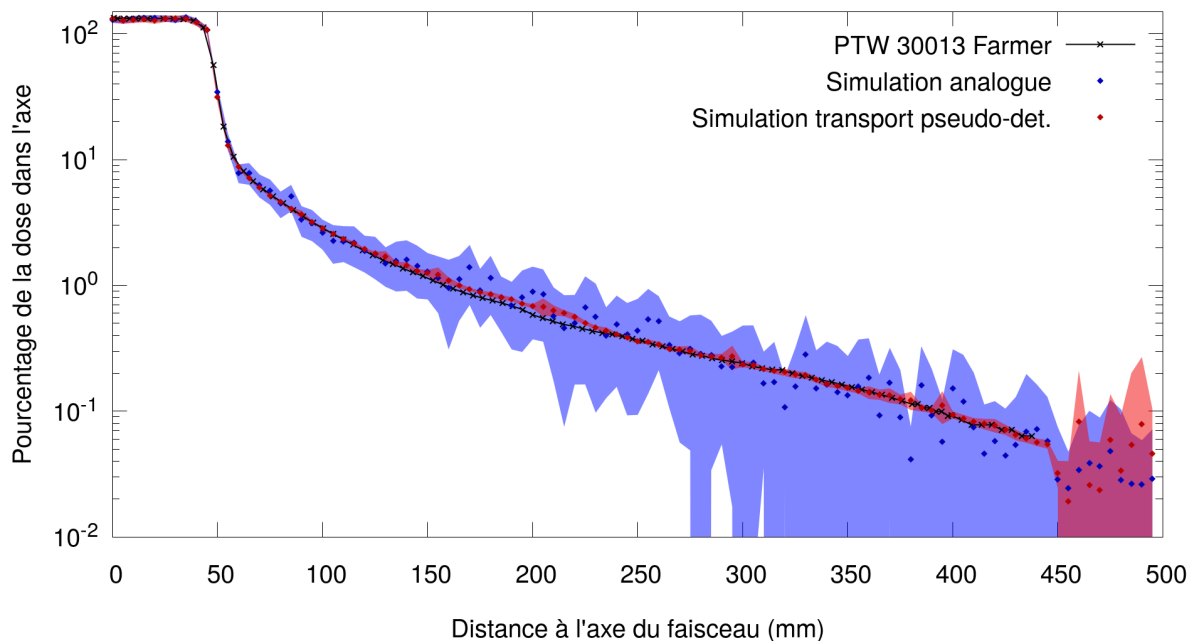


FIGURE 116 – Profils de dose à 5 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

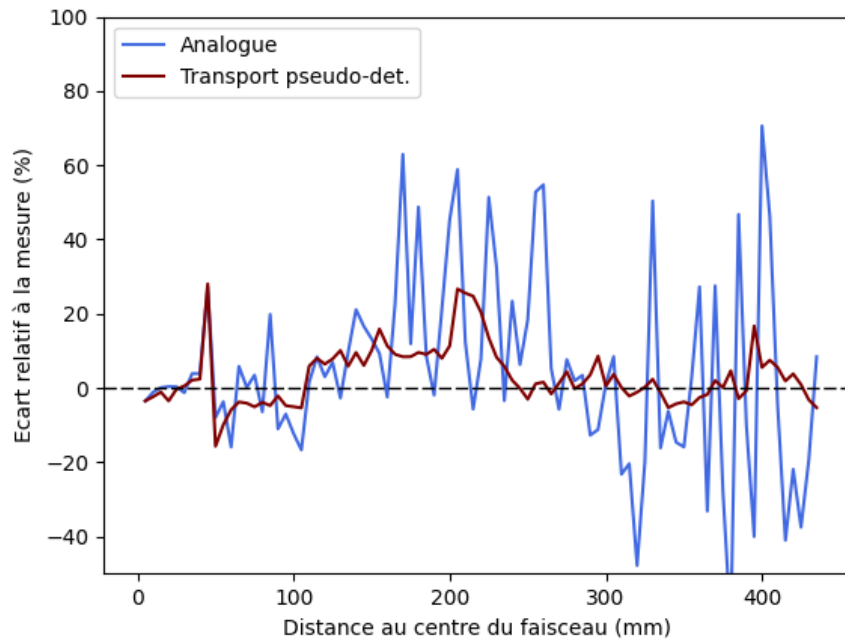


FIGURE 117 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 5 cm de profondeur selon l’axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête.

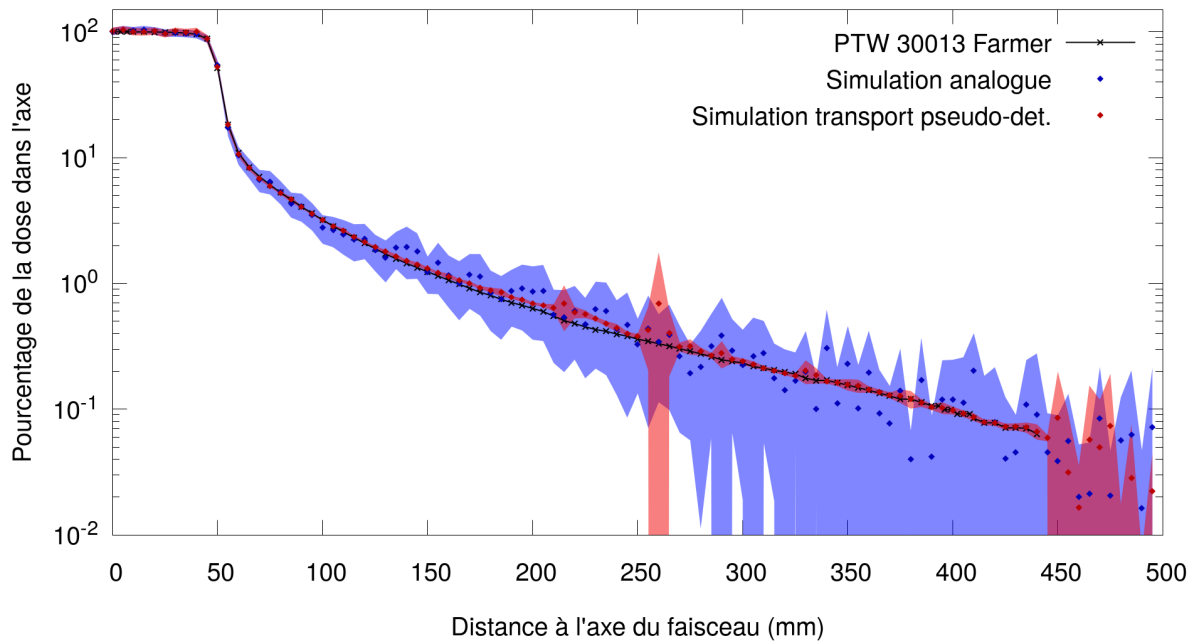


FIGURE 118 – Profils de dose à 10 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

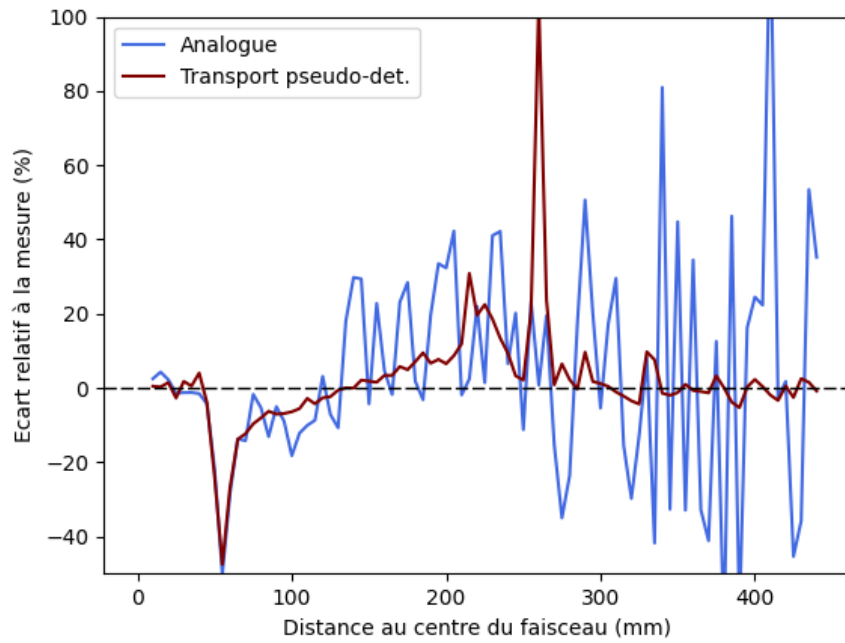


FIGURE 119 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 10 cm de profondeur selon l’axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête.

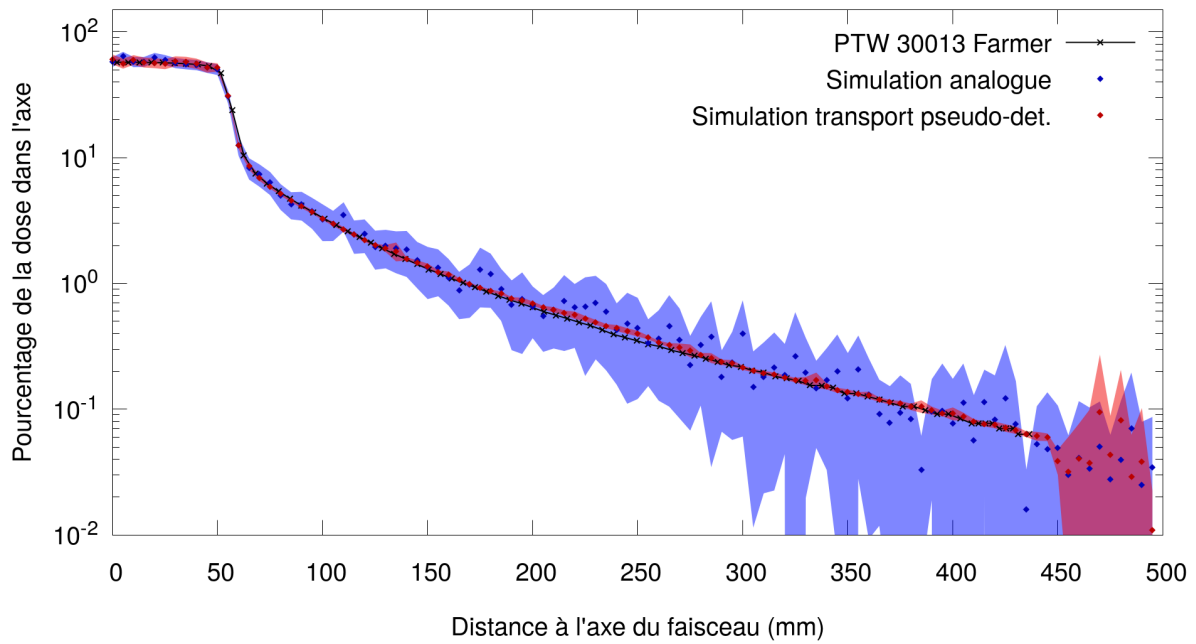


FIGURE 120 – Profils de dose à 20 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

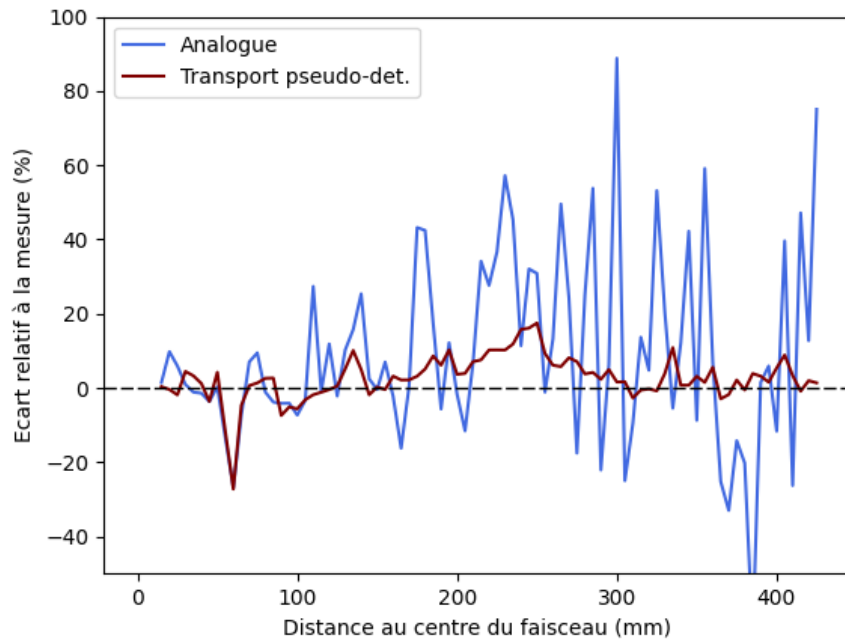


FIGURE 121 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 20 cm de profondeur selon l’axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête.

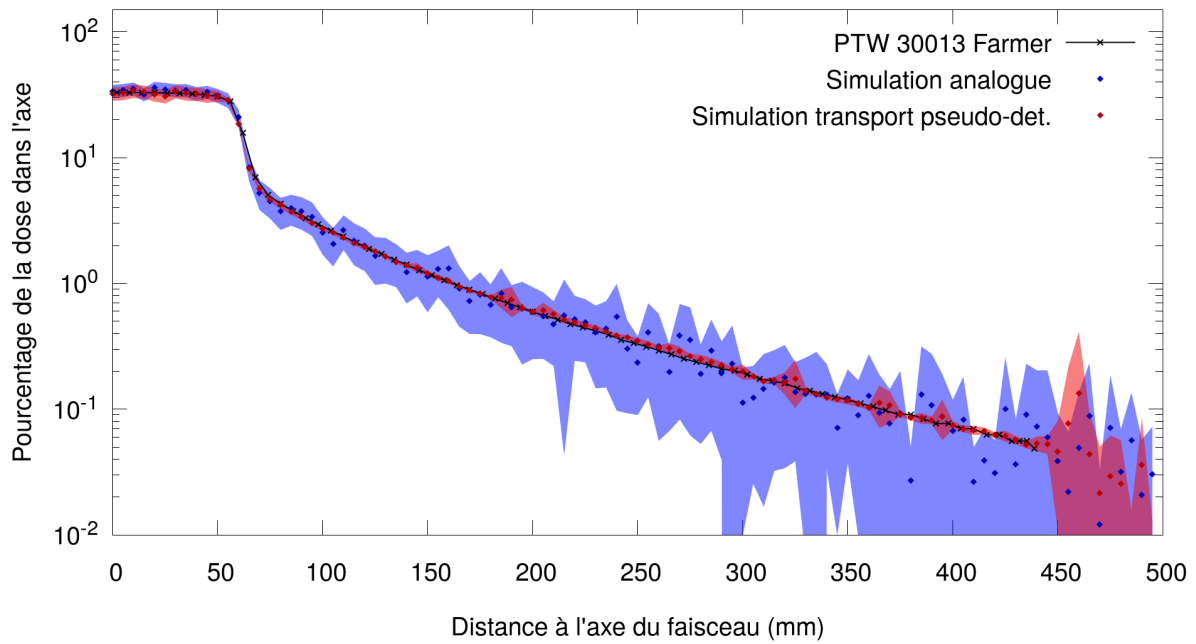


FIGURE 122 – Profils de dose à 30 cm de profondeur selon l'axe droite-gauche, obtenus par simulation avec et sans le transport pseudo-déterministe, à l'aide de la géométrie de l'accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d'acier englobant les éléments de la tête, comparés au profil mesuré.

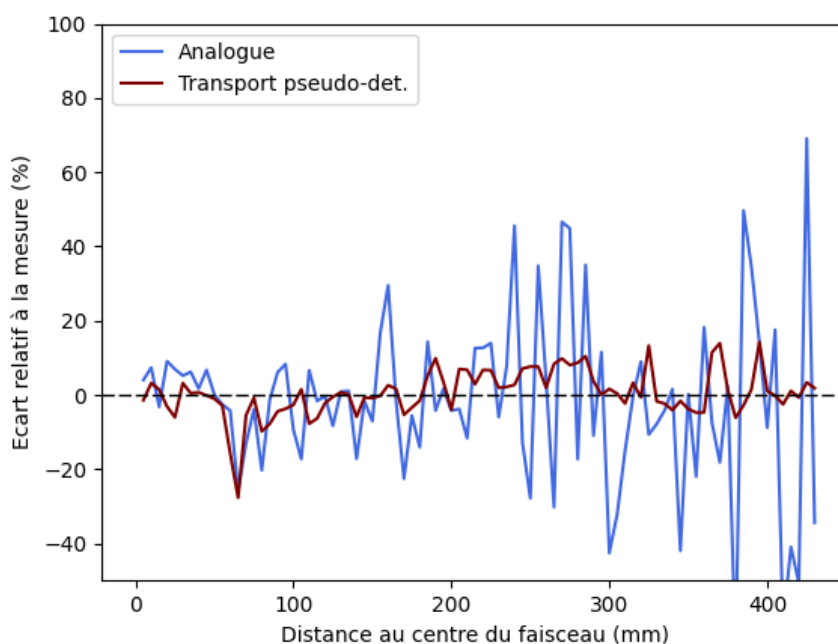


FIGURE 123 – Écarts entre les profils simulés et mesurés à 30 cm de profondeur selon l’axe droite-gauche, obtenus avec la géométrie de l’accélérateur à laquelle ont été ajoutés les blocs de plomb, un décalage des lames situées en dehors du champ et une enceinte d’acier englobant les éléments de la tête.

Tous les profils sont très proches des mesures, et présentent à nouveau une incertitude bien plus faible lorsque le transport pseudo-déterministe est utilisé. On observe toutefois, en particulier à 5 cm de profondeur (figures 116 et 117), que la dose est à nouveau surestimée aux alentours de 20 cm de l’axe du faisceau. Cette différence s’atténue encore une fois avec la profondeur, jusqu’à être à peine visible à 30 cm de profondeur (figures 122 et 123), et peut donc très probablement être attribuée aux fuites dans la tête de l’accélérateur. De même que précédemment, il serait possible d’ajouter des protections supplémentaires autour de la tête pour limiter les fuites (par exemple augmenter l’épaisseur d’acier ou le remplacer par du plomb), mais, puisque la géométrie exacte de l’accélérateur reste inconnue, cette modélisation risquerait de n’être valable que pour cette configuration particulière. Une modélisation plus générale nécessiterait une connaissance plus précise de la géométrie et des matériaux de l’accélérateur.

Le transport pseudo-déterministe a toutefois permis de grandement améliorer le modèle d’accélérateur utilisé, en mettant en évidence des erreurs dans la modélisation qui n’impactaient cependant pas la dose estimée dans le champ. Compte tenu du temps de calcul et de la précision nécessaires, cette correction n’aurait pas été possible à l’aide de la simulation analogue seule.

8.4 Conclusion

L’objectif de la validation expérimentale de l’implémentation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe était de démontrer qu’il peut être utilisé pour obtenir correctement

la dose hors-champ, à la fois relative et absolue, dans un cas où la simulation analogue ne parvient pas à donner une estimation fiable. Cette validation a été réalisée en comparant le résultat obtenu à des mesures de dose hors-champ dans l'air à basse énergie. La réduction de variance a permis d'obtenir un résultat avec une incertitude encore élevée, mais une série d'approximations réalisées à partir du spectre en énergie des photons permet de retrouver une valeur proche de la mesure. Dans ce cas, on estime que le calcul est accéléré d'un facteur proche de 1300 par le transport pseudo-déterministe, mais ce dernier permet surtout d'obtenir un résultat dans un temps pour lequel le calcul analogue n'est pas exploitable.

Le code étant validé à la fois numériquement par comparaison au résultat analogue et expérimentalement par confrontation à des mesures, la dernière section présentait un cas d'application du transport pseudo-déterministe. La méthode a été utilisée pour estimer les doses hors-champ pour une modélisation d'un accélérateur linéaire médical irradiant une cuve à eau, dans laquelle certains éléments de la tête de la machine étaient manquants, créant une différence importante sur les profils hors-champ simulés par rapport aux profils mesurés. L'utilisation du transport pseudo-déterministe a permis de réaliser rapidement des estimations des doses à distance du champ et de valider les corrections du modèle, dont l'effet n'aurait pas été visible par simulation analogue en raison de l'importante variance rencontrée, pour des temps de calcul pourtant élevés.

Cette application permet non seulement de consolider la fiabilité de l'implémentation réalisée au cours de cette thèse, mais également de confirmer l'utilité et la nécessité du transport pseudo-déterministe pour les estimations des doses hors-champ.

Conclusion générale et perspectives

La radiothérapie est l'un des principaux traitements contre le cancer, mais les rayonnements utilisés pour détruire les cellules tumorales, bien que concentrés sur la région à traiter, sont susceptibles de toucher des régions plus éloignées et peuvent, à leur tour, favoriser l'apparition de cancers secondaires ou de maladies radio-induites qui apparaîtront potentiellement plusieurs dizaines d'années après un traitement.

On sait aujourd'hui que cette irradiation périphérique est due en grande partie à trois sources de rayonnements : les particules diffusées dans la tête de l'accélérateur, celles diffusées dans le patient, et celles traversant la collimation de la machine. Les doses occasionnées varient grandement selon le type d'accélérateur et la modalité de traitement choisie, et les techniques les plus récentes, si elles cherchent à améliorer la conformation du faisceau, tendent malgré tout vers des niveaux de dose plus importants à distance du champ. Il est donc essentiel de disposer d'outils permettant d'évaluer cette dose de manière personnalisée pour chaque patient. Malheureusement, d'une part, les mesures en conditions cliniques sont difficilement réalisables, voire impossibles, et ne sont donc pas effectuées. D'autre part, les logiciels de planification de traitement ne permettent pas le calcul de la dose périphérique. L'estimation de cette dose par Monte-Carlo, quant à elle, présente deux difficultés majeures. D'une part, une modélisation précise de l'accélérateur utilisé, voire de son environnement, est requise. D'autre part, les estimations à distance du champ présentent une importante variance et demandent donc un temps de calcul extrêmement important. Le travail effectué au cours de cette thèse s'est essentiellement concentré sur ce second point, via l'introduction d'une méthode de réduction de variance dans un code de simulation Monte-Carlo.

La méthode Monte-Carlo, telle qu'utilisée pour le calcul de dose, est appliquée à la simulation des particules émises par l'accélérateur : trajectoires, interactions, particules secondaires créées, absorptions... La dose déposée dans une région donnée est comptabilisée au cours de l'histoire d'un grand nombre de particules, permettant une estimation de la dose déposée par particule source via la moyenne des valeurs obtenues. Cette moyenne est toutefois entachée d'une incertitude statistique qui décroît à mesure que des particules sont simulées, mais qui peut être réduite par l'intermédiaire de techniques de réduction de variance. Celles-ci modifient la manière dont sont transportées les particules, qui ne suivent alors plus fidèlement les lois physiques et qui voient leur poids modifié en conséquence.

Le transport pseudo-déterministe est la méthode choisie pour réduire la variance des estimations de dose hors-champ, en raison de sa capacité à conduire de nombreuses particules dans une région arbitraire de l'espace. Celle-ci prévoit la définition d'une sphère entourant une région donnée, jusqu'à laquelle une particule dite «déterministe» est amenée avec un poids réduit lors de chaque diffusion d'un photon. En contrepartie, le véritable photon diffusé ne peut y entrer au cours de son prochain déplacement. Avant d'en réaliser l'implémentation, la méthode a néanmoins dû être formalisée rigoureusement afin d'abord de vérifier l'absence de biais dans les estimations recherchées, mais également de clarifier son fonctionnement, en particulier au niveau des particules secondaires créées par la diffusion. Cette formalisation a été faite par le biais d'une construction pas à pas de la variable aléatoire correspondant aux particules déterministe et complémentaires de la méthode.

La méthode du transport pseudo-déterministe a ensuite pu être implémentée dans le code de simulation Monte-Carlo Phoebe à travers un algorithme qui s'insère naturellement dans la boucle de transport du programme via une spécialisation des fonctions d'échantillonnage des

interactions et du pas parcouru par les photons. Un système de statut des particules permet de différencier les photons déterministes à faire parvenir jusqu'à la sphère pseudo-déterministe en réduisant leur poids de manière appropriée, les photons complémentaires à éliminer de la simulation s'ils entrent dans cette même sphère au cours du pas suivant leur diffusion, et les photons analogues qui suivent l'algorithme par défaut du code.

La structure élémentaire de la méthode étant implémentée dans Phoebe, le travail suivant a consisté à y associer d'autres techniques de réduction de variance destinées à limiter ses inconvénients, et en particulier à restreindre le nombre de photons envoyés à la sphère, dont la grande majorité contribue de manière négligeable à l'estimation de la dose. Ces défauts sont comblés en partie par l'ajout de roulettes russes, dont la probabilité de survie associée dépend du poids de la particule, utilisées à diverses étapes de l'histoire des photons déterministes. La technique du splitting est également employée sur les photons de poids très élevé afin de recentrer la distribution des poids dans la sphère et réduire davantage la variance. Enfin, le transport pseudo-déterministe est également utilisé partiellement ou en totalité non pas seulement lors de diffusions mais également lors de l'émission de photons par d'autres interactions.

Cette implémentation a été testée d'abord numériquement, par une comparaison systématique des résultats obtenus en simulation analogue à ceux obtenus en utilisant le transport pseudo-déterministe. L'utilisation d'une série de simulations, répétée pour chaque version du code et chaque technique auxiliaire ajoutée, a permis de s'assurer de l'absence de biais dans les estimations tout en évaluant l'apport de chaque technique complémentaire. En parallèle, elle offre un premier aperçu du gain apporté par cette implémentation sur la rapidité du calcul, et permet de constater une importante variation de ce gain avec les paramètres de simulation. Le transport pseudo-déterministe permet notamment une accélération du calcul plus importante pour les sphères de petite taille et à grande distance du faisceau. Enfin, une comparaison avec la méthode DXTRAN du code MCNP, utilisant une version similaire du procédé de transport pseudo-déterministe, a été réalisée dans un cas simple où la réduction de variance de MCNP est configurée par défaut. Cette étude montre un bon accord entre les estimations de dose et une amélioration de l'efficacité plus importante pour Phoebe, en particulier lorsque l'énergie est élevée.

La dernière partie de cette thèse est d'abord une validation expérimentale dans une étude des doses hors-champ produites par un tube à rayons X. Dans la configuration étudiée, la simulation analogue ne permettait pas d'obtenir un résultat exploitable dans un temps raisonnable, malgré l'utilisation d'un cluster de calcul. En revanche, l'utilisation du transport pseudo-déterministe pour obtenir le spectre des photons entrant dans le détecteur, associé à une série d'approximations utilisées pour estimer le dépôt d'énergie des particules, permet d'obtenir rapidement un débit de dose très proche de celui qui peut être mesuré. Cette dernière validation a été suivie d'une première application dans laquelle le transport pseudo-déterministe est utilisé pour réaliser des estimations du profil de dose à distance du champ produit par un accélérateur linéaire médical. La méthode permet dans ce cas de corriger la modélisation de ce dernier grâce à des calculs rapides, jusqu'à obtenir un excellent accord entre la simulation et la mesure.

De nombreuses perspectives sont envisageables, autant au niveau de l'optimisation du code que de sa caractérisation. Un gain de performance est encore très largement possible, et un important travail de programmation pourrait encore être réalisé sur l'implémentation de la méthode dans Phoebe. Il s'agit notamment, en plus d'optimisations liées à l'algorithme

et au langage, de permettre le calcul de la carte d'importance sur l'ensemble des processeurs lorsque la simulation est utilisée en parallèle, ainsi que l'application totale du transport pseudo-déterministe lors de la création de photons par des électrons ou des positons. Au niveau de sa caractérisation et de sa validation, une comparaison plus poussée avec MCNP serait nécessaire, notamment en optimisant cette fois-ci les paramètres de chaque méthode. Enfin, une évaluation du transport pseudo-déterministe dans des cas plus complexes et encore plus proches de la réalité permettrait de déterminer le véritable apport de la méthode pour des cas cliniques. Celle-ci pourrait passer, par exemple, par la simulation de champs simples, puis de traitements complexes de type RCMI sur fantômes anthropomorphes.

L'outil développé est tout de même d'ores et déjà capable d'accélérer considérablement le calcul des doses hors-champ, tout en restant relativement simple d'utilisation. Il devrait permettre un calcul rapide des doses périphériques dans des cas réels, et pourrait donc être utilisé en clinique pour estimer indirectement les risques d'effets secondaires de chaque patient et obtenir les données épidémiologiques nécessaires à la compréhension de l'effet des faibles doses sur le corps humain. De plus, l'étude approfondie du transport pseudo-déterministe peut faciliter son implémentation future dans un autre code de simulation, ou même directement dans un logiciel de planification de traitement.

Notons enfin que l'application de la méthode ne se limite pas à la radiothérapie. Elle peut notamment être utilisée en radioprotection ou dans le domaine du démantèlement, mais plus généralement, tout problème présentant des similarités avec celui de la dose hors-champ (qui inclut par exemple une région éloignée que peu de particules atteignent) peut éventuellement être traité à l'aide du transport pseudo-déterministe implémenté dans Phoebe.

Annexes

A Interactions des photons dans la matière

A.1 Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique, illustré sur la figure 124 consiste en l'absorption d'un photon par un atome lors de la collision avec l'un de ses électrons internes, qui est alors expulsé avec une énergie E_e égale à la différence entre l'énergie du photon incident et son énergie de liaison avec l'atome :

$$E_e = E_\gamma - E_l \quad (224)$$

Avec E_γ l'énergie du photon et E_l l'énergie de liaison de l'électron. L'énergie perdue par le photon dépend donc de la couche électronique touchée par celui-ci, et l'interaction ne peut avoir lieu que si E_γ est supérieure à E_l , qui est généralement de l'ordre de quelques keV pour les atomes courants.

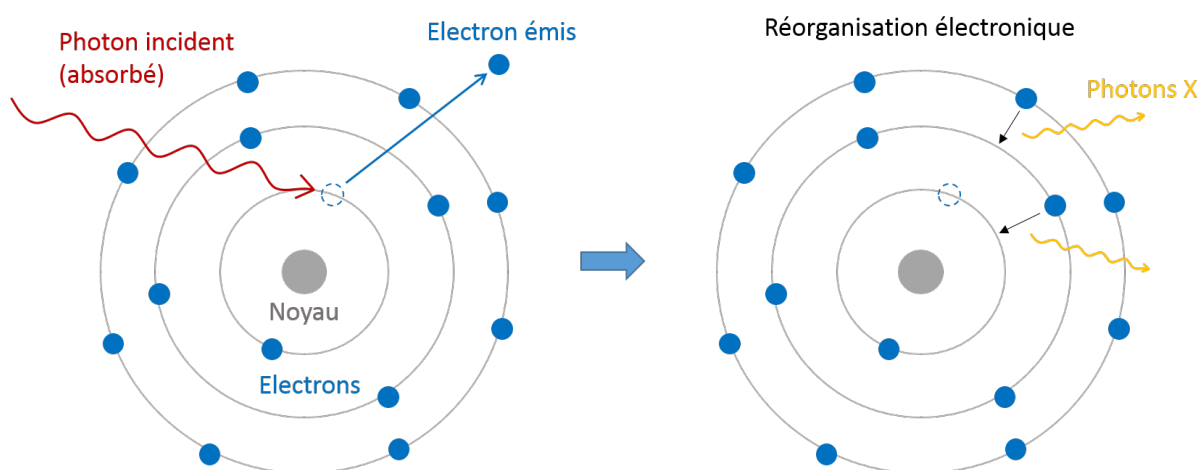


FIGURE 124 – Représentation schématisée de l'effet photoélectrique suivi d'une réorganisation des couches électroniques de l'atome touché.

Cette interaction est suivie par une réorganisation des couches électroniques de l'atome duquel l'électron a été expulsé, conduisant potentiellement à l'émission de nombreux photons de fluorescence et d'électrons Auger.

La probabilité d'effet photoélectrique diminue rapidement avec l'énergie du photon, et est très fortement dépendante du numéro atomique du milieu traversé (elle varie en Z^3/E^3 avec Z le numéro atomique et E l'énergie du photon). Elle est prépondérante à basse énergie et pour les matériaux à numéro atomique élevé. Dans l'eau, elle devient très peu probable au-delà de 100 à 200 keV et est majoritaire en dessous de 50 keV.

A.2 Diffusions Compton et Rayleigh

La diffusion Compton est une diffusion inélastique qui intervient lorsqu'un photon interagit avec une particule chargée (en général un électron des couches externes de l'atome cible), étant absorbé puis émis dans une nouvelle direction avec une énergie différente.

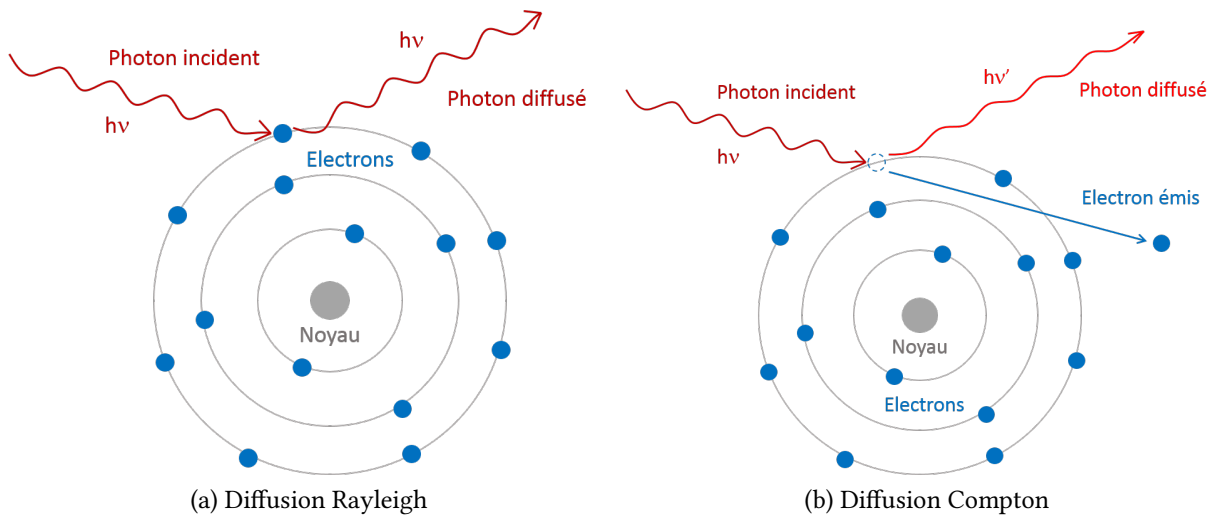


FIGURE 125 – Représentation schématisée de la diffusion Rayleigh en (a) et de la diffusion Compton en (b) d'un photon sur un électron atomique.

Une partie de l'énergie du photon est transmise à l'électron, et le photon est dévié de sa trajectoire. Dans le cas d'un électron au repos, l'angle de déviation du photon et l'énergie perdue par ce dernier sont reliés par la formule suivante :

$$E_C = \frac{E}{1 + (E/m_e c^2)(1 - \cos \theta)} \quad (225)$$

où E_C est l'énergie du photon diffusé, E l'énergie du photon incident, m_e la masse de l'électron et θ l'angle de déviation du photon.

Le probabilité de diffusion Compton est inversement proportionnelle à l'énergie du photon incident et pratiquement indépendante du numéro atomique. Elle est généralement l'interaction la plus probable en radiothérapie.

Contrairement à la diffusion Compton, un photon subissant une diffusion Rayleigh par interaction avec un atome de son milieu de propagation conserve son énergie et voit uniquement sa direction modifiée. L'interaction est présente aux énergies utilisées en radiothérapie, en particulier aux énergies les plus faibles, mais reste minoritaire face à la diffusion Compton à partir de 15 keV dans l'eau.

A.3 Création de paires

La production de paires, illustrée sur la figure 126 ci-après, est une interaction d'un photon de haute énergie avec le champ créé par le noyau d'un atome.

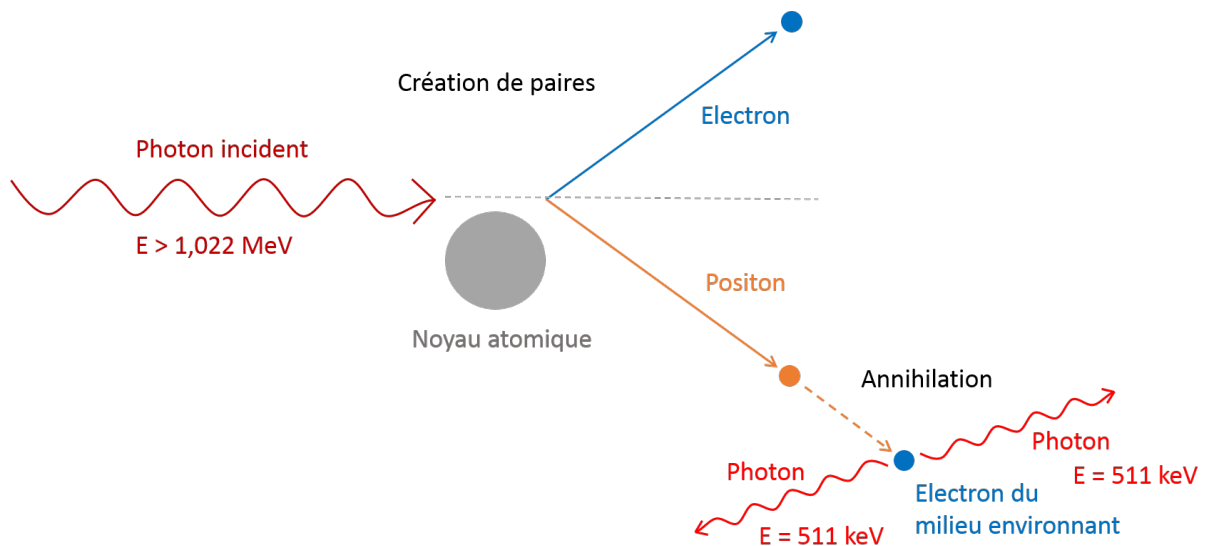


FIGURE 126 – Représentation schématisée du processus de création de paire électron-positon, suivi d’une annihilation du positon avec un nouvel électron.

Le photon est absorbé et crée une paire électron-positon. Le positon peut à son tour interagir et s’annihiler avec un électron de son environnement pour créer, aux énergies rencontrées en radiothérapie, deux photons d’énergie 511 keV de direction opposée.

La production de paires n’est possible que lorsque l’énergie du photon est supérieure à l’énergie de masse d’un électron et d’un positon (soit environ 1,022 MeV). Elle est prédominante à haute énergie, représentant environ un tiers des interactions dans l’eau à 10 MeV, la moitié à 24 MeV, et encore davantage au-delà.

B Utilisation du transport pseudo-déterministe dans Phoebe

B.1 Définition du fichier d’entrée

L’utilisation du transport pseudo-déterministe se fait via la définition d’un processus alternatif, qui se trouve donc dans la section *AlternativeProcesses* du fichier de configuration *.json*. S’il est utilisé, le processus de transport pseudo-déterministe doit être défini (et configuré de manière identique) pour chaque matériau de la simulation. Dans le cas contraire, les matériaux dans lesquels la méthode n’est pas demandée utilisent des fonctions de transport analogues. Le transport des particules déterministes risque alors d’être interrompu. Les paramètres à définir sont donnés dans le tableau ci-dessous.

Paramètre	Types de valeurs attendues et signification
ProcessType	<p>Type de processus</p> <p>«DeScattering» Le processus demandé est le transport pseudo-déterministe.</p>
SphereRadius	<p>Paramètres de la sphère</p> <p>Nombre positif Le rayon, en centimètres, de la sphère externe.</p> <p>InnerRadius Nombre positif Le rayon, en centimètres, de la sphère interne. Il doit être inférieur à SphereRadius.</p> <p>SphereCenter Tableau de trois valeurs Les coordonnées (x, y, z) du centre de la sphère.</p> <p>Qratio Nombre positif Augmentation du ratio de la probabilité d'échantillonner la direction vers la sphère interne par rapport à la sphère externe $Q = 1$ L'échantillonnage est uniforme sur l'ensemble des deux sphères $Q > 1$ Plus la valeur est grande, et plus un grand nombre de particules seront dirigées vers la sphère interne $Q < 1$ Non recommandé, diminue la probabilité de tirer des directions vers la sphère interne</p>
preSim	
gridMinPos	
gridMaxPos	
xCells	<p>Paramètres des techniques auxiliaires</p> <p>Nombre positif Le nombre de showers simulées pour estimer la carte d'importance. L'utilisation des roulettes et du splitting commence après <i>preSim</i> showers. Remarque : les showers ne contenant aucun photon ne pouvant être comptabilisées par le processus alternatif, les roulettes et le splitting peuvent parfois s'activer plus tard que prévu.</p>
yCells	Tableau de trois valeurs Les valeurs de x, y et z pour les bornes minimum de la carte d'importance.
zCells	Tableau de trois valeurs Les valeurs de x, y et z pour les bornes maximum de la carte d'importance. La carte s'étend ensuite de <i>gridMinPos.x</i> à <i>gridMaxPos.x</i> , et ainsi de suite en y et z. Il est recommandé qu'elle recouvre l'ensemble de la géométrie de calcul.
	Entier positif Nombre de cellules ou voxels de la carte d'importance dans la dimension x.
	Entier positif Nombre de cellules ou voxels de la carte d'importance dans la dimension y.
	Entier positif Nombre de cellules ou voxels de la carte d'importance dans la dimension z.

Un exemple de la section *AlternativeProcesses* du fichier d'entrée est donné ci-dessous sur la figure 127.

```

"AlternativeProcesses": {
  "1": {
    "ProcessesType": "DeScattering",
    "SphereRadius": 1.0,           Le rayon externe est de 1 cm
    "InnerRadius": 0.5,          Le rayon interne est de 0.5 cm
    "Qratio": 5.0,              Le facteur Q vaut 5
    "SphereCenter": [
      10.0,
      10.0,                       La sphère est centrée en
      20.0                          [10,10,20]
    ],
    "preSim": 100000.0,         L'estimation de la carte d'importance
    "GridMinPos": [             se fait sur les 100000 premières
      -15.0,
      -15.0,
      -15.0
    ],
    "GridMaxPos": [             La carte d'importance s'étend de
      15.0,                       -15 à 15 cm dans la dimension x,
      15.0,                       de -15 to +15 en y,
      26.0                          et de -15 à +26 en z
    ],
    "xCells": 20,               La carte contient 20x20x20 voxels
    "yCells": 20,               La taille des voxels dépend des
    "zCells": 20                  dimensions de la carte d'importance
  },
  "2": {idem},                 Les mêmes paramètres sont déclarés
  "3": {idem},                 pour chaque matériau
  .
  .
  .
  },                             Fin de la section des processus
                                  alternatifs

```

FIGURE 127 – Exemple de paramétrage du transport pseudo-déterministe dans Phoebe au format *.json*.

B.2 Recommandations d'usage et commentaires

Taille et paramètres de la sphère

Si aucune sphère interne n'est utilisée, il est recommandé que la sphère externe englobe entièrement le module dans lequel l'estimation est réalisée, tout en étant la plus petite possible. Si la sphère est bien plus grande que la région d'intérêt, un grand nombre de particules risque de ne pas atteindre la région d'intérêt et l'effet de la méthode s'en trouverait réduit. À l'inverse, si la sphère est plus petite que la région d'intérêt, de larges fluctuations peuvent apparaître dans les poids entrants. Les photons analogues peuvent en effet déposer leur énergie dans le module sans passer par le transport pseudo-déterministe. Une seconde possibilité consiste à définir une sphère externe plus grande que la région d'intérêt, qui, elle, est recouverte par la sphère interne. Le choix du facteur Q permet d'échantillonner davantage vers la sphère interne et donc de perdre moins de particules déterministes qui seraient dirigées hors de la zone d'estimation, tout en limitant à l'aide de la sphère externe le nombre d'applications de la méthode proches de la région d'intérêt, qui pourraient créer des sauts de variance.

Calcul de la carte d'importance

Le paramètre *preSim* doit, dans l'idéal, représenter une petite fraction du nombre total de showers à simuler. Les roulettes et les splittings ne commençant qu'après *preSim* showers, la simulation est d'abord moins efficace. Il doit donc être suffisamment grand pour permettre une estimation correcte de la carte d'importance, mais rester assez petit pour ne pas trop retarder l'utilisation des techniques auxiliaires. De plus, plus la résolution de la carte d'importance est fine, et plus le nombre de particules nécessaires à son estimation est grand. En revanche, elle peut améliorer davantage l'efficacité si son estimation est meilleure. L'équilibre entre le temps d'activation des techniques auxiliaires, la précision de l'estimation de la carte d'importance et sa résolution dépend très largement du cas étudié. C'est pour cette raison que ces paramètres sont laissés libres à l'utilisateur. De manière générale toutefois, même calculée de manière très grossière, la carte d'importance ne ralentit pas le calcul par la suite.

Limitations de géométrie

La définition de la géométrie ne doit pas contenir d'espaces vides qu'une particule déterministe pourrait traverser en chemin jusqu'à la sphère. Au cours du transport d'un photon déterministe, son poids est mis à jour après chaque pas en fonction de la distance parcourue, connaissant le milieu traversé. Dans le cas où la particule rencontre un espace vide au cours de son pas, il n'est pas nécessaire d'échantillonner un nouveau pas : la fonction *step* déplace donc automatiquement la particule à l'interface la plus proche et renvoie la distance totale parcourue sans passer par *jump*. Le poids ne peut donc pas être mis à jour au moment où la particule quitte son module d'origine pour entrer dans le module vide, et, la prochaine fois où le poids est mis à jour, la distance parcourue dans le vide est considérée comme étant parcourue dans le matériau d'origine. Il est toutefois possible de remplacer le matériau contenu dans les modules vides par de l'air très peu dense (par exemple de densité 10^{-35}), qui agit de la même manière mais force l'appel de *jump* à l'entrée de ces modules pour mettre le poids à jour.

Dans le cas de l'estimation d'un spectre en énergie des photons ou de l'utilisation d'un estimateur similaire, pour lequel les photons entrant dans un module donné sont comptabilisés, il est important de s'assurer que le module en question est entièrement inclus dans la sphère pseudo-déterministe. Dans le cas contraire, l'estimation peut être biaisée par des photons en cours de transport déterministe jusqu'à la sphère, traversant le module avec un poids encore incorrect puisque ce dernier est mis à jour à leur arrivée sur la sphère.

Finalement, la sphère externe ne doit pas être exactement superposée à un module sphérique de même centre et de même rayon. Lorsqu'un photon déterministe est transporté jusqu'à la sphère, il est arrêté à sa surface et entame l'échantillonnage d'un pas analogue. Dans le cas de deux sphères identiques, la particule est arrêtée exactement sur l'interface entre deux modules et des anomalies numériques peuvent apparaître lors de sa localisation avant l'échantillonnage du prochain pas. Afin de limiter le risque que ce problème survienne, 10^{-6} centimètres sont automatiquement ajoutés au rayon de la sphère externe par rapport à la valeur donnée par l'utilisateur. Il semble en effet plus probable qu'un utilisateur superpose la sphère sur un module sphérique, plutôt qu'il définisse une sphère de rayon *exactement* 10^{-6} centimètres plus petit que le module en question.

Références

- [Agostinelli *et al.*, 2003] Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G., Behner, F., Bellagamba, L., Boudreau, J., Broglia, L., Brunengo, A., Burkhardt, H., Chauvie, S., Chuma, J., Chytráček, R., Cooperman, G., Cosmo, G., Degtyarenko, P., Dell'Acqua, A., Depaola, G., Dietrich, D., Enami, R., Feliciello, A., Ferguson, C., Fesefeldt, H., Folger, G., Foppiano, F., Forti, A., Garelli, S., Giani, S., Giannitrapani, R., Gibin, D., Cadenas, J. G., González, I., Abril, G. G., Greeniaus, G., Greiner, W., Grichine, V., Grossheim, A., Guatelli, S., Gumplinger, P., Hamatsu, R., Hashimoto, K., Hasui, H., Heikkinen, A., Howard, A., Ivanchenko, V., Johnson, A., Jones, F., Kallenbach, J., Kanaya, N., Kawabata, M., Kawabata, Y., Kawaguti, M., Kelner, S., Kent, P., Kimura, A., Kodama, T., Kokoulin, R., Kossov, M., Kurashige, H., Lamanna, E., Lampén, T., Lara, V., Lefebvre, V., Lei, F., Liendl, M., Lockman, W., Longo, F., Magni, S., Maire, M., Medernach, E., Minamimoto, K., de Freitas, P. M., Morita, Y., Murakami, K., Nagamatu, M., Nartallo, R., Nieminen, P., Nishimura, T., Ohtsubo, K., Okamura, M., O'Neale, S., Oohata, Y., Paech, K., Perl, J., Pfeiffer, A., Pia, M., Ranjard, F., Rybin, A., Sadilov, S., Salvo, E. D., Santin, G., Sasaki, T., Savvas, N., Sawada, Y., Scherer, S., Sei, S., Sirotenko, V., Smith, D., Starkov, N., Stoecker, H., Sulkimo, J., Takahata, M., Tanaka, S., Tcherniaev, E., Tehrani, E. S., Tropeano, M., Truscott, P., Uno, H., Urban, L., Urban, P., Verderi, M., Walkden, A., Wander, W., Weber, H., Wellisch, J., Wenaus, T., Williams, D., Wright, D., Yamada, T., Yoshida, H., and Zschesche, D. (2003). Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3) :250 – 303.
- [Arlen *et al.*, 1971] Arlen, M., Higinbotham, N. L., Huvos, A. G., Marcove, R. C., Miller, T., and Shah, I. C. (1971). Radiation-induced sarcoma of bone. *Cancer*, 28(5) :1087–1099.
- [Balasubramanian *et al.*, 2006] Balasubramanian, R., Sellakumar, P., Bilimagga, R. S., Supe, S. S., and Sankar, B. (2006). Measurements of peripheral dose for multileaf collimator based linear accelerator. *Reports of Practical Oncology & Radiotherapy*, 11(6) :281 – 285.
- [Balderson *et al.*, 2015] Balderson, M., Koger, B., and Kirkby, C. (2015). The relative biological effectiveness of out-of-field dose. *Physics in medicine and biology*, 61 :114–130.
- [Bednarz and Xu, 2009] Bednarz, B. and Xu, X. G. (2009). Monte carlo modeling of a 6 and 18 MV varian clinac medical accelerator for in-field and out-of-field dose calculations : development and validation. *Physics in Medicine and Biology*, 54(4) :N43–N57.
- [Berger, 1963] Berger, M. J. (1963). Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles.
- [Berrington de González *et al.*, 2013] Berrington de González, A., Gilbert, E., Curtis, R., Inskip, P., Kleinerman, R., Morton, L., Rajaraman, P., and Little, M. (2013). Second solid cancers after radiation therapy : A systematic review of the epidemiologic studies of the radiation dose-response relationship. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 86 :224–233.
- [Bertelsen *et al.*, 2010] Bertelsen, A., Hansen, C., Johansen, J., and Brink, C. (2010). Single arc volumetric modulated arc therapy of head and neck cancer. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 95 :142–8.

- [Bessières, 2013] Bessières, I. (2013). *Développement et validation expérimentale d'un outil de détermination de la dose hors-champ en radiothérapie*. PhD thesis, Université Paris-Sud XI, MIPÈGE.
- [Bielajew and Rogers, 1988] Bielajew, A. F. and Rogers, D. W. (1988). Variance-reduction techniques. In *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, pages 407–419. Springer.
- [Blais *et al.*, 2012] Blais, A., Lederer, E., Oliver, M., and Leszczynski, K. (2012). Static and rotational step-and-shoot imrt treatment plans for the prostate : A risk comparison study. *Medical physics*, 39 :1069–78.
- [Born, 1969] Born, M. (1969). *Atomic Physics*. Blackie // Son.
- [Bouillon *et al.*, 2011] Bouillon, K., Haddy, N., Delaloge, S., Garbay, J.-R., Garsi, J.-P., Brindel, P., Mousannif, A., Lê, M., Labbe, M., Arriagada, R., Jouglà, E., Chavaudra, J., Diallo, I., Rubino, C., and de Vathaire, F. (2011). Long-term cardiovascular mortality after radiotherapy for breast cancer. *Journal of the American College of Cardiology*, 57 :445–52.
- [Box and Muller, 1958] Box, G. E. P. and Muller, M. E. (1958). A note on the generation of random normal deviates. *Ann. Math. Statist.*, 29(2) :610–611.
- [Brenner *et al.*, 2000] Brenner, D., Curtis, R., Hall, E., and Ron, E. (2000). Second malignancies in prostate carcinoma patients after radiotherapy compared with surgery. *Cancer*, 88 :398 – 406.
- [Brenner *et al.*, 2003] Brenner, D., Doll, R., Goodhead, D., Hall, E., Land, C., Little, J., Lubin, J., Preston, D., Preston, R., Puskin, J., Ron, E., Sachs, R., Samet, J., Setlow, R., and Zaider, M. (2003). Cancer risks attributable to low doses of ionizing radiation : Assessing what we really know. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 100 :13761–6.
- [Butson *et al.*, 2010] Butson, M., Yu, P., Cheung, T., and Alnawaf, H. (2010). Energy response of the new ebt2 radiochromic film to x-ray radiation. *Radiation Measurements - RADIAT MEAS*, 45.
- [Butson *et al.*, 2006] Butson, M. J., Cheung, T., and Yu, P. K. (2006). Weak energy dependence of ebt gafchromic film dose response in the 50kvp–10mvp x-ray range. *Applied Radiation and Isotopes*, 64(1) :60 – 62.
- [Cahan *et al.*, 1948] Cahan, W. G., Woodard, H. Q., Higinbotham, N. L., Stewart, F. W., and Coley, B. L. (1948). Sarcoma in irradiated bone. report of eleven cases. *Cancer*, 1 :3–29.
- [Carrillo-Infante *et al.*, 2007] Carrillo-Infante, C., Abbadessa, G., Bagella, L., and Giordano, A. (2007). Viral infections as a cause of cancer (review). *International journal of oncology*, 30 :1521–8.
- [Castellino *et al.*, 2010] Castellino, S., Geiger, A., Mertens, A., Leisenring, W., Tooze, J., Goodman, P., Stovall, M., Robison, L., and Hudson, M. (2010). Morbidity and mortality in long-term survivors of hodgkin lymphoma : A report from the childhood cancer survivor study. *Blood*, 117 :1806–16.
- [Cazoulat, 2013] Cazoulat, G. (2013). *Radiothérapie guidée par l'image du cancer de la prostate : vers l'intégration des déformations anatomiques*.
- [Chargari and Cosset, 2013] Chargari, C. and Cosset, J.-M. (2013). The issue of low doses in radiation therapy and impact on radiation-induced secondary malignancies. *Bulletin du cancer*, 100.

- [Chaturvedi *et al.*, 2007] Chaturvedi, A., Engels, E., Gilbert, E., Chen, B., Storm, H., Lynch, C., Hall, P., Langmark, F., Pukkala, E., Kaijser, M., Andersson, M., Fosså, S., Joensuu, H., Boice, J., Kleinerman, R., and Travis, L. (2007). Second cancers among 104760 survivors of cervical cancer : Evaluation of long-term risk. *Journal of the National Cancer Institute*, 99 :1634–43.
- [Chofor *et al.*, 2010] Chofor, N., Harder, D., Rühmann, A., Willborn, K., Wiezorek, T., and Poppe, B. (2010). Experimental study on photon-beam peripheral doses, their components and some possibilities for their reduction. *Physics in medicine and biology*, 55 :4011–27.
- [Chuang *et al.*, 2008] Chuang, C., Larson, D., Zytkevich, A., Smith, V., and Petti, P. (2008). Peripheral dose measurement for cyberknife radiosurgery with upgraded linac shielding. *Medical physics*, 35 :1494–6.
- [Chuang *et al.*, 2002] Chuang, C., Verhey, L., and Xia, P. (2002). Investigation of the use of mosfet for clinical imrt dosimetric verification. *Medical physics*, 29 :1109–15.
- [CIRC, 2018] CIRC (2018). Centre international de Recherche sur le Cancer, Lyon. Les cancers attribuables au mode de vie et à l’environnement en France métropolitaine.
- [Colnot, 2019] Colnot, J. (2019). *Risques de complications associés à la radiothérapie externe : étude comparative des doses délivrées aux tissus sains par les techniques avancées de radiothérapie*. PhD thesis, Université Paris-Sud.
- [Colnot *et al.*, 2019] Colnot, J., Barraux, V., Loiseau, C., Berejny, P., Batalla, A., Gschwind, R., and Huet, C. (2019). A new monte carlo model of a cyberknife® system for the precise determination of out-of-field doses. *Physics in Medicine & Biology*, 64(19) :195008.
- [Correa *et al.*, 2008] Correa, C., Das, I., Litt, H., Ferrari, V., Hwang, W., Solin, L., and Harris, E. (2008). Association between tangential beam treatment parameters and cardiac abnormalities after definitive radiation treatment for left-sided breast cancer. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 72 :508–16.
- [Cosset *et al.*, 2018] Cosset, J.-M., Hetnał, M., and Chargari, C. (2018). Second cancers after radiotherapy : Update and recommandations. *Radioprotection*, 53.
- [Cowppli-Bony *et al.*, 2016] Cowppli-Bony, A., Uhry, Z., Remontet, L., Guizard, A.-V., Voirin, N., Monnereau, A., Bouvier, A.-M., Colonna, M., Bossard, N., Woronoff, A.-S., and Grosclaude, P. (2016). Survie des personnes atteintes de cancer en France métropolitaine 1989-2013. Étude à partir des registres des cancers du réseau Francim. Partie 1 – Tumeurs solides. Synthèse.
- [Curtis *et al.*, 2006] Curtis, R., Ron, E., Hankey, B., and Hoover, R. (2006). New malignancies following breast cancer. *New Malignancies among Cancer Survivors : SEER Cancer Registries, 1973-2000*, pages 181–205.
- [Darby *et al.*, 2013] Darby, S. C., Ewertz, M., McGale, P., Bennet, A. M., Blom-Goldman, U., Brønnum, D., Correa, C., Cutter, D., Gagliardi, G., Gigante, B., Jensen, M.-B., Nisbet, A., Peto, R., Rahimi, K., Taylor, C., and Hall, P. (2013). Risk of ischemic heart disease in women after radiotherapy for breast cancer. *New England Journal of Medicine*, 368(11) :987–998. PMID : 23484825.
- [Das *et al.*, 2008] Das, I., Cheng, C.-W., Watts, R., Ahnesjö, A., Gibbons, J., Li, X., Lowenstein, J., Mitra, R., and Zhu, T. (2008). Accelerator beam data commissioning equipment and procedures : Report of the tg-106 of the therapy physics committee of the aapm. *Medical physics*, 35 :4186–215.

- [Dasu *et al.*, 2005] Dasu, A., Toma-Dasu, I., Olofsson, J., and Karlsson, M. (2005). The use of risk estimation models for the induction of secondary cancers following radiotherapy. *Acta oncologica (Stockholm, Sweden)*, 44 :339–47.
- [D.B. Pelowitz, 2011] D.B. Pelowitz, E. (2011). *MCNPX Users Manual Version 2.7.0*. LA-CP-11-00438.
- [De Salles *et al.*, 2008] De Salles, A., Gorgulho, A., Selch, M., Marco, J., and Agazaryan, N. (2008). *Radiosurgery from the brain to the spine : 20 years experience*, pages 163–168.
- [de Vathaire *et al.*, 2012] de Vathaire, F., El-Fayech, C., Fedhila, F., Haddy, N., Guibout, C., Winter, D., Thomas-Teinturier, C., Veres, C., Jackson, A., Pacquement, H., Schlumberger, M., Hawkins, M., Diallo, I., and Oberlin, O. (2012). Radiation dose to the pancreas and risk of diabetes mellitus in childhood cancer survivors : A retrospective cohort study. *The lancet oncology*, 13 :1002–10.
- [de Vathaire *et al.*, 1999] de Vathaire, F., Hawkins, M., Campbell, S., Oberlin, O., Raquin, M.-A., Schlienger, J., Shamsaldin, A., Diallo, I., Bell, J., Grimaud, E., Hardiman, C., Jean Leon, L., Daly-Schveitzer, N., Panis, X., Zucker, J.-M., Sancho-Garnier, H., Eschwège, F., Chavaudra, J., and Lemerle, J. (1999). Second malignant neoplasms after a first cancer in childhood : Temporal pattern of risk according to type of treatment. *British journal of cancer*, 79 :1884–93.
- [Defossez *et al.*, 2019] Defossez, G., Le Guyader-Peyrou, S., Uhry, Z., Grosclaude, P., Remontet, L., Colonna, M., Dantony, E., Delafosse, P., Molinié, F., Woronoff, A.-S., Bouvier, A.-M., Bossard, N., and Monnereau, A. (2019). Estimations nationales de l'incidence et de la mortalité par cancer en France métropolitaine entre 1990 et 2018. Étude à partir des registres des cancers du réseau Francim. Résultats préliminaires. Synthèse.
- [Delaby *et al.*, 2016] Delaby, N., Bellec, J., Bouvier, J., Jouyaux, F., Perdrieux, M., Castelli, J., Lecouillard, I., Blot, V., Manens, J., and Lafond, C. (2016). Ep-1622 : Cyberknife® m6tm : peripheral dose evaluation in brain treatments. *Radiotherapy and Oncology*, 119 :S755–S756.
- [Diallo *et al.*, 2009] Diallo, I., Haddy, N., Adjadj, E., Samand, A., Quiniou, E., Chavaudra, J., Alziar, I., Perret, N., Guérin, S., Lefkopoulos, D., and de Vathaire, F. (2009). Frequency distribution of second solid cancer locations in relation to the irradiated volume among 115 patients treated for childhood cancer. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 74 :876–83.
- [Diallo *et al.*, 1996] Diallo, I., Lamon, A., Shamsaldin, A., Grimaud, E., [de Vathaire], F., and Chavaudra, J. (1996). Estimation of the radiation dose delivered to any point outside the target volume per patient treated with external beam radiotherapy. *Radiotherapy and Oncology*, 38(3) :269 – 271.
- [Edwards and Mountford, 2004] Edwards, C. and Mountford, P. (2004). Near surface photon energy spectra outside a 6 mv field edge. *Physics in medicine and biology*, 49 :N293–301.
- [Feinendegen, 2005] Feinendegen, L. E. (2005). Evidence for beneficial low level radiation effects and radiation hormesis. *The British journal of radiology*, 78 925 :3–7.
- [Fernández-Varea *et al.*, 1993] Fernández-Varea, J., Mayol, R., Baró, J., and Salvat, F. (1993). On the theory and simulation of multiple elastic scattering of electrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 73(4) :447 – 473.

- [Ferrufino-Ponce and Henderson, 2006] Ferrufino-Ponce, Z. and Henderson, B. (2006). Radiotherapy and cataract formation. *Seminars in ophthalmology*, 21 :171–80.
- [Fitzmaurice *et al.*, 2017] Fitzmaurice, C., Allen, C., Barber, R., Barregard, L., Bhutta, Z., Brenner, H., Dicker, D., Chimed-Orchir, O., Dandona, R., Dandona, L., Fleming, T., Forouzanfar, M., Hancock, M., Hay, D., Hunter-Merrill, M., Huynh, C., Hosgood, H., Johnson, C., Jonas, J., and Naghavi, M. (2017). Global, regional, and national cancer incidence, mortality, years of life lost, years lived with disability, and disability-adjusted life-years for 32 cancer groups, 1990 to 2015 a systematic analysis for the global burden of disease study. *JAMA Oncology*, 3 :524–548.
- [Followill *et al.*, 1997] Followill, D., Geis, P., and Boyer, A. (1997). Estimates of whole-body dose equivalent produced by beam intensity modulated conformal therapy. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, 38(3) :667 – 672.
- [Fraass and Geijn, 1983] Fraass, B. and Geijn, J. (1983). Peripheral dose from megavolt beams. *Medical physics*, 10 :809–18.
- [Francois *et al.*, 1988] Francois, P., Beurtheret, C., and Dutreix, A. (1988). Calculation of the dose delivered to organs outside the radiation beams. *Medical Physics*, 15(6) :879–883.
- [Franke *et al.*, 2013] Franke, B. C., Kensek, R. P., and Prinja, A. K. (2013). Evaluation of monte carlo electron-transport algorithms in the integrated tiger series codes for stochastic-media simulations.
- [Galvin *et al.*, 2004] Galvin, J., Ezzell, G., Eisbrauch, A., Yu, C., Butler, B., Xiao, Y., Rosen, I., Rosenman, J., Sharpe, M., Xing, L., Xia, P., Lomax, T., Low, D., and Palta, J. (2004). Implementing imrt in clinical practice : A joint document of the american society for therapeutic radiology and oncology and the american association of physicists in medicine. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 58 :1616–34.
- [Giessen, 2001] Giessen, P. (2001). Peridose, a software program to calculate the dose outside the primary beam in radiation therapy. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 58 :209–13.
- [Giessen and Hurkmans, 1993] Giessen, P. and Hurkmans, C. (1993). Calculation and measurement of the dose to points outside the primary beam for co-60 gamma radiation. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 27 :717–24.
- [Green *et al.*, 1999] Green, D., Hyland, A., Chung, C., Zevon, M., and Hall, B. (1999). Cancer and cardiac mortality among 15-year survivors of cancer diagnosed during childhood or adolescence. *Journal of clinical oncology : official journal of the American Society of Clinical Oncology*, 17 :3207–15.
- [Guldner *et al.*, 2006] Guldner, L., Haddy, N., Pein, F., Diallo, I., Shamsaldin, A., Dahan, M., Lebidois, J., Merlet, P., Villazon, E., Sidi, D., Sakiroglu, O., Hartmann, O., Leftakopoulos, D., and de Vathaire, F. (2006). Radiation dose and long term risk of cardiac pathology following radiotherapy and anthracyclin for a childhood cancer. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 81 :47–56.
- [Gérard *et al.*, 2010] Gérard, J.-P., Thariat, J., Giraud, P., and Cosset, J.-M. (2010). Histoire de l'évolution des techniques de radiothérapie. *Bulletin du Cancer*, 97(7) :743 – 751.
- [Haddy *et al.*, 2016] Haddy, N., Diallo, S., El-Fayech, C., Schwartz, B., Pein, F., Hawkins, M., Veres, C., Oberlin, O., Guibout, C., Pacquement, H., Munzer, M., N'Guyen, T. D., Bondiau, P.-Y., Berchery, D., Laprie, A., Scarabin, P.-Y., Jouven, X., Bridier, A., Koscielny, S., Deutsch, E.,

- Diallo, I., and de Vathaire, F. (2016). Cardiac diseases following childhood cancer treatment. *Circulation*, 133(1) :31–38.
- [Hall, 2020] Hall, E. (2020). Imrt, protons and the risk of second cancers.
- [Hall and Wu, 2003] Hall, E. and Wu, C. (2003). Radiation-induced second cancers : the impact of 3d-crt and imrt. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 56 :83–8.
- [Hall, 2003] Hall, E. J. (2003). The crooked shall be made straight : dose response relationships for carcinogenesis.
- [Hall *et al.*, 1999] Hall, P., Granath, F., Lundell, M., Olsson, K., and Holm, L. (1999). Lenticular opacities in individuals exposed to ionizing radiation in infancy. *Radiation research*, 152 :190–5.
- [Han *et al.*, 2015] Han, E., Paudel, N., Sung, J., Yoon, M., Chung, W., and Kim, D. W. (2015). Estimation of the risk of secondary malignancy arising from whole-breast irradiation : Comparison of five radiotherapy modalities, including tomohda. *Oncotarget*, 7.
- [Hanahan and Weinberg, 2000] Hanahan, D. and Weinberg, R. (2000). The hallmarks of cancer. *Cell*, 100 :57–70.
- [Handa *et al.*, 2011] Handa, O., Naito, Y., and Yoshikawa, T. (2011). Redox biology and gastric carcinogenesis : The role of helicobacter pylori. *Redox report : communications in free radical research*, 16 :1–7.
- [Harrison *et al.*, 2001] Harrison, L., Shasha, D., Shiao, L., White, C., Ramdeen, B., and Portenoy, R. (2001). Prevalence of anemia in cancer patients undergoing radiation therapy. *Seminars in oncology*, 28 :54–9.
- [Hauri *et al.*, 2016] Hauri, P., Hälgl, R., Besserer, J., and Schneider, U. (2016). A general model for stray dose calculation of static and intensity-modulated photon radiation. *Medical Physics*, 43 :1955–1968.
- [Hauri and Schneider, 2019] Hauri, P. and Schneider, U. (2019). Whole-body dose equivalent including neutrons is similar for 6 mv and 15 mv imrt, vmat, and 3d conformal radiotherapy. *Journal of Applied Clinical Medical Physics*, 20.
- [Hebbard and Wilson, 1955] Hebbard, D. F. and Wilson, P. R. (1955). The Effect of Multiple Scattering on Electron Energy Loss Distributions. *Australian Journal of Physics*, 8 :90.
- [Hellekalek, 1998] Hellekalek, P. (1998). Good random number generators are (not so) easy to find. *Mathematics and Computers in Simulation (MATCOM)*, 46(5) :485–505.
- [Henk *et al.*, 1993] Henk, J., Whitelocke, R., Warrington, A., and Bessel, E. (1993). Radiation dose to the lens and cataract formation. *International Journal of Radiation Oncology • Biology • Physics*, 25 :815–820.
- [Herbert, 2007] Herbert, F. (2007). *Gamma- and X-Ray Interactions in Matter*, chapter 7, pages 124–159. John Wiley & Sons, Ltd.
- [Howell *et al.*, 2006] Howell, R., Hertel, N., Wang, Z., Hutchinson, J., and Fullerton, G. (2006). Calculation of effective dose from measurements of secondary neutron spectra and scattered photon dose from dynamic mlc imrt for 6 mv, 15 mv, and 18 mv beam energies. *Medical physics*, 33 :360–8.

- [Howell *et al.*, 2010] Howell, R., Scarboro, S., Kry, S., and Yaldo, D. (2010). Accuracy of out-of-field dose calculations by a commercial treatment planning system. *Physics in medicine and biology*, 55 :6999–7008.
- [Huang *et al.*, 2013] Huang, J., Followill, D., Wang, X., and Kry, S. (2013). Accuracy and sources of error of out-of field dose calculations by a commercial treatment planning system for intensity-modulated radiation therapy treatments. *Journal of applied clinical medical physics / American College of Medical Physics*, 14 :4139.
- [INCa, 2015] INCa (2015). Institut national du cancer, Santé publique France. Baromètre cancer 2015.
- [INCa, 2016] INCa (2016). Institut National de Cancer. Protonthérapie, indications et capacité de traitement - Juin 2016.
- [INCa, 2019] INCa (2019). Institut National du Cancer. Les cancers en France en 2018, édition 2019.
- [Jagetic and Newhauser, 2015] Jagetic, L. J. and Newhauser, W. D. (2015). A simple and fast physics-based analytical method to calculate therapeutic and stray doses from external beam, megavoltage x-ray therapy. *Physics in Medicine and Biology*, 60(12) :4753–4775.
- [Jan *et al.*, 2004] Jan, S., Santin, G., Strul, D., Staelens, S., Assié, K., Autret, D., Avner, S., Barbier, R., Bardiès, M., Bloomfield, P. M., Brasse, D., Breton, V., Bruyndonckx, P., Buvat, I., Chatziioannou, A. F., Choi, Y., Chung, Y. H., Comtat, C., Donnarieix, D., Ferrer, L., Glick, S. J., Groiselle, C. J., Guez, D., Honore, P.-F., Kerhoas-Cavata, S., Kirov, A. S., Kohli, V., Koole, M., Krieguer, M., van der Laan, D. J., Lamare, F., Langeron, G., Lartizien, C., Lazaro, D., Maas, M. C., Maigne, L., Mayet, F., Melot, F., Merheb, C., Pennacchio, E., Perez, J., Pietrzyk, U., Rannou, F. R., Rey, M., Schaart, D. R., Schmidlein, C. R., Simon, L., Song, T. Y., Vieira, J.-M., Visvikis, D., de Walle, R. V., Wieërs, E., and Morel, C. (2004). GATE : a simulation toolkit for PET and SPECT. *Physics in Medicine and Biology*, 49(19) :4543–4561.
- [Joosten *et al.*, 2011] Joosten, A., Bochud, F., Baechler, S., Levi, F., Mirimanoff, R.-O., and Moeckli, R. (2011). Variability of a peripheral dose among various linac geometries for second cancer risk assessment. *Physics in medicine and biology*, 56 :5131–51.
- [Joosten *et al.*, 2013] Joosten, A., Matzinger, O., Jeanneret-Sozzi, W., Bochud, F., and Moeckli, R. (2013). Evaluation of organ-specific peripheral doses after 2-dimensional, 3-dimensional and hybrid intensity modulated radiation therapy for breast cancer based on monte carlo and convolution/superposition algorithms : Implications for secondary cancer risk assessment. *Radiotherapy and Oncology*, 106(1) :33 – 41.
- [Journy *et al.*, 2018] Journy, N., Mansouri, I., Allodji, R., Demoor-Goldschmidt, C., Debiche, G., Haddy, N., Rubino, C., Veres, C., Zrafi, W., Rivera, S., Diallo, I., and de Vathaire, F. (2018). Volume effects of radiotherapy on the risk of second primary cancers : A systematic review of clinical and epidemiological studies. *Radiotherapy and Oncology*, 131.
- [Jurado *et al.*, 2008] Jurado, J., Bashir, R., and Burket, M. (2008). Radiation-induced peripheral artery disease. *Catheterization and cardiovascular interventions : official journal of the Society for Cardiac Angiography and Interventions*, 72 :563–8.
- [Jäkel, 2007] Jäkel, O. (2007). State of the art in hadron therapy. *AIP Conference Proceedings*, 958 :70–77.
- [Kahn, 1955] Kahn, H. (1955). Use of different monte carlo sampling techniques.

- [Kanavy and Gerstenblith, 2011] Kanavy, H. and Gerstenblith, M. (2011). Ultraviolet radiation and melanoma. *Seminars in cutaneous medicine and surgery*, 30 :222–8.
- [Kase *et al.*, 1983] Kase, K. R., Svensson, G. K., Wolbarst, A. B., and Marks, M. A. (1983). Measurements of dose from secondary radiation outside a treatment field. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, 9(8) :1177 – 1183.
- [Kastan, 2008] Kastan, M. B. (2008). Dna damage responses : Mechanisms and roles in human disease. *Molecular Cancer Research*, 6(4) :517–524.
- [Kawrakow, 2000] Kawrakow, I. (2000). Accurate condensed history monte carlo simulation of electron transport. i. egsnrc, the new egs4 version. *Medical Physics*, 27(3) :485–498.
- [Kim *et al.*, 2013] Kim, D., Chung, W., Shin, D., Hong, S., Park, S., Park, S.-Y., Chung, K., Lim, Y., Shin, D., Lee, S., Lee, H.-H., and Yoon, M. (2013). Risk of second cancer from scattered radiation of intensity-modulated radiotherapies with lung cancer. *Radiation oncology (London, England)*, 8 :47.
- [Klein *et al.*, 2006] Klein, E., Maserang, B., Wood, R., and Mansur, D. (2006). Peripheral doses from pediatric imrt. *Medical physics*, 33 :2525–31.
- [Klein and Nishina, 1929] Klein, O. and Nishina, Y. (1929). Über die streuung von strahlung durch freie elektronen nach der neuen relativistischen quantendynamik von dirac. *Zeitschrift für Physik*, 52(11) :853–868.
- [Kleinerman *et al.*, 2010] Kleinerman, R. A., Weinstock, R. M., and Mabuchi, K. (2010). High-Dose Abdominal Radiotherapy and Risk of Diabetes Mellitus. *Archives of Internal Medicine*, 170(16) :1506–1507.
- [Knežević *et al.*, 2011] Knežević, Ž., Beck, N., Milković, Đ., Miljanić, S., and Ranogajec-Komor, M. (2011). Characterisation of rpl and tl dosimetry systems and comparison in medical dosimetry applications. *Radiation measurements*, 46(12) :1582–1585.
- [Knežević *et al.*, 2013] Knežević, Ž., Stolarczyk, L., Bessieres, I., Bordy, J. M., Miljanić, S., and Olko, P. (2013). Photon dosimetry methods outside the target volume in radiation therapy : Optically stimulated luminescence (osl), thermoluminescence (tl) and radiophotoluminescence (rpl) dosimetry. *Radiation measurements*, 57 :9–18.
- [Krishnan *et al.*, 2019] Krishnan, J., Shetty, J., Rao, S., and Hegde, S. (2019). Evaluation of out of field dose and comparison of dose to healthy tissue between vmat and imrt plans. 2 :19–25.
- [Kry *et al.*, 2007a] Kry, S., Followill, D., White, R., Stovall, M., Kuban, D., and Salehpour, M. (2007a). Uncertainty of calculated risk estimates for secondary malignancies after radiotherapy. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 68 :1265–71.
- [Kry *et al.*, 2005] Kry, S., Salehpour, M., Followill, D., Stovall, M., Kuban, D., White, R., and Rosen, I. (2005). The calculated risk of fatal secondary malignancies from intensity modulated radiation therapy. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 62 :1195–203.
- [Kry *et al.*, 2007b] Kry, S., Starkschall, G., Antolak, J., and Salehpour, M. (2007b). Evaluation of the accuracy of fetal dose estimates using tg-36 data. *Medical physics*, 34 :1193–7.
- [Kry *et al.*, 2017] Kry, S. F., Bednarz, B., Howell, R. M., Dauer, L., Followill, D., Klein, E., Paganetti, H., Wang, B., Wu, C.-S., and George Xu, X. (2017). Aapm tg 158 : Measurement and calculation of doses outside the treated volume from external-beam radiation therapy. *Medical Physics*, 44(10) :e391–e429.

- [Kry *et al.*, 2007c] Kry, S. F., Titt, U., Followill, D., Pönisch, F., Vassiliev, O. N., White, R. A., Stovall, M., and Salehpour, M. (2007c). A monte carlo model for out-of-field dose calculation from high-energy photon therapy. *Medical Physics*, 34(9) :3489–3499.
- [Kry *et al.*, 2006] Kry, S. F., Titt, U., Pönisch, F., Followill, D., Vassiliev, O. N., Allen White, R., Mohan, R., and Salehpour, M. (2006). A monte carlo model for calculating out-of-field dose from a varian beam. *Medical Physics*, 33(11) :4405–4413.
- [Le Pogam *et al.*, 2015] Le Pogam, M.-A., Rubino, C., A, S., M, G., MC, L., Haddy, N., Lefkopoulos, D., Diallo, I., and de Vathaire, F. (2015). Radiation dose, fractionation and second cancer risk after breast cancer radiotherapy.
- [Lederman, 1981] Lederman, M. (1981). The early history of radiotherapy : 1895–1939. *International Journal of Radiation Oncology*Biography*Physics*, 7(5) :639–648.
- [Lee *et al.*, 2014] Lee, B., Lee, S., Sung, J., and Yoon, M. (2014). Radiotherapy-induced secondary cancer risk for breast cancer : 3d conformal therapy versus IMRT versus VMAT. *Journal of Radiological Protection*, 34(2) :325–331.
- [Lee *et al.*, 2012] Lee, V., Ng, S., Leung, T., au, G., and Kwong, D. (2012). Dosimetric predictors of radiation-induced acute nausea and vomiting in imrt for nasopharyngeal cancer. *International journal of radiation oncology, biology, physics*, 84 :176–82.
- [Little *et al.*, 1999] Little, M., Muirhead, C., Haylock, R., and Thomas, J. (1999). Relative risks of radiation-associated cancer : Comparison of second cancer in therapeutically irradiated populations with the japanese atomic bomb survivors. *Radiation and environmental biophysics*, 38 :267–283.
- [Loeb and Harris, 2008] Loeb, L. and Harris, C. (2008). Advances in chemical carcinogenesis : A historical review and prospective. *Cancer research*, 68 :6863–72.
- [Lux and Koblinger, 1991] Lux, I. and Koblinger, L. (1991). *Monte Carlo Transport Methods : Neutron and Photon Calculations*. CRC Press, Inc.
- [Lynch, 2010] Lynch, M. (2010). Rate, molecular spectrum, and consequences of human mutation. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 107 :961–8.
- [Madan, 2018] Madan, R. (2018). Radiation induced secondary malignancies : a review article.
- [Massillon-Jl *et al.*, 2012] Massillon-Jl, G., Chiu-Tsao, S.-T., Muñoz, I., and Chan, M. (2012). Energy dependence of the new gafchromic ebt3 film : Dose response curves for 50 kv, 6 and 15 mv x-ray beams. *International Journal of Medical Physics, Clinical Engineering and Radiation Oncology*, 1 :60–65.
- [Massillon-JL *et al.*, 2006] Massillon-JL, G., Gamboa-deBuen, I., and Brandan, M. E. (2006). Onset of supralinear response in TLD-100 exposed to 60co gamma-rays. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 39(2) :262–268.
- [Mazuy *et al.*, 2016] Mazuy, M., Barbieri, M., Breton, D., and D’Albis, H. (2016). L’évolution démographique récente de la france : baisse de la fécondité, augmentation de la mortalité.
- [McGrath and Irving, 1973] McGrath, E. and Irving, D. (1973). Techniques for efficient monte carlo simulation. volume 3. variance reduction. Technical report, SCIENCE APPLICATIONS INC LA JOLLA CA.

- [Meeks *et al.*, 2002] Meeks, S., Paulino, A., Pennington, E., Simon, J., Skwarchuk, M., and Buatti, J. (2002). In vivo determination of extra-target doses received from serial tomotherapy. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 63 :217–22.
- [Mertens *et al.*, 2001] Mertens, A., Yasui, Y., Neglia, J., Potter, J., Nesbit, M., Ruccione, K., Smithson, W., and Robison, L. (2001). Late mortality experience in five-year survivors of childhood and adolescent cancer : The childhood cancer survivor study. *Journal of clinical oncology : official journal of the American Society of Clinical Oncology*, 19 :3163–72.
- [Metropolis and Ulam, 1949] Metropolis, N. and Ulam, S. (1949). The monte carlo method. *Journal Of The American Statistical Association*, 44(247) :335–341.
- [Mille *et al.*, 2018] Mille, M., Jung, J., Lee, C., Kuzmin, G., and Lee, C. (2018). Comparison of normal tissue dose calculation methods for epidemiological studies of radiotherapy patients. *Journal of Radiological Protection*, 38.
- [Mucci *et al.*, 2016] Mucci, L., Hjelmborg, J., Harris, J., Czene, K., Havelick, D., Scheike, T., Graff, R., Holst, K., Möller, S., Unger, R., Mcintosh, C., Nuttall, E., Brandt, I., Penney, K., Hartman, M., Kraft, P., Parmigiani, G., Christensen, K., Koskenvuo, M., and Kaprio, J. (2016). Familial risk and heritability of cancer among twins in nordic countries. *JAMA*, 315 :68–76.
- [Muller, 1927] Muller, H. (1927). Artificial transmutation of the gene. *Science (New York, N.Y.)*, 66 :84–7.
- [Mutic and Klein, 1999] Mutic, S. and Klein, E. E. (1999). A reduction in the aapm tg-36 reported peripheral dose distributions with tertiary multileaf collimation. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, 44(4) :947 – 953.
- [Mutic and Low, 1998] Mutic, S. and Low, D. (1998). Whole-body dose from tomotherapy delivery. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, 42(1) :229 – 232.
- [Möller *et al.*, 2001] Möller, T., Garwicz, S., Barlow, L., Winther, J., Glatte, E., Olafsdottir, G., Olsen, J., Perfekt, R., Ritvanen, A., Sankila, R., and Tulinius, H. (2001). Decreasing late mortality among five-year survivors of cancer in childhood and adolescence : A population-based study in the nordic countries. *Journal of clinical oncology : official journal of the American Society of Clinical Oncology*, 19 :3173–81.
- [National Research Council, 1995] National Research Council (1995). *Radiation Dose Reconstruction for Epidemiologic Uses*. The National Academies Press, Washington, DC.
- [National Research Council, 2006] National Research Council (2006). *Health Risks from Exposure to Low Levels of Ionizing Radiation : BEIR VII Phase 2*. The National Academies Press, Washington, DC.
- [Newhauser *et al.*, 2017] Newhauser, W., Schneider, C., Wilson, L., Shrestha, S., and Donahue, W. (2017). A review of analytical models of stray radiation exposures from photon- and proton-beam radiotherapies. *Radiation protection dosimetry*, 180 :1–7.
- [Nowell, 1976] Nowell, P. (1976). The clonal evolution of tumor cell populations. *Science*, 194(4260) :23–28.
- [Ohno *et al.*, 2006] Ohno, T., Kakinuma, S., Kato, S., Tsujii, H., and Shimada, Y. (2006). Risk of second cancers after radiotherapy for cervical cancer. *Expert review of anticancer therapy*, 6 :49–57.

- [Oliver *et al.*, 2009] Oliver, M., Ansbacher, W., and Beckham, W. (2009). Comparing planning time, delivery time and plan quality for imrt, rapidarc and tomotherapy. *Journal of applied clinical medical physics / American College of Medical Physics*, 10 :3068.
- [Park *et al.*, 2017] Park, H., Lee, S.-W., Sung, S. Y., and Choi, B. (2017). Treatment outcome and risk analysis for cataract after radiotherapy of localized ocular adnexal mucosa-associated lymphoid tissue (malt) lymphoma. *Radiation Oncology Journal*, 35 :249–256.
- [Paszat *et al.*, 2007] Paszat, L., Vallis, K., Benk, V., Groome, P., Mackillop, W., and Wielgosz, A. (2007). A population-based case-cohort study of the risk of myocardial infarction following radiation therapy for breast cancer. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 82 :294–300.
- [Petti *et al.*, 2006] Petti, P., Chuang, C., Smith, V., and Larson, D. (2006). Peripheral doses in cyberknife radiosurgery. *Medical physics*, 33 :1770–9.
- [Plagnard, 2016] Plagnard, J. (2016). Measurement of the Ine-Inhb/lmd x-ray tube spectra by x-ray spectrometry. *Revue française de métrologie*, n°43, 2016-3 :37–47.
- [Poeta *et al.*, 2015] Poeta, S., Stock, M., Jourani, Y., Brouwer, T., Vandekerkhove, C., and Simon, S. (2015). Ep-1377 : Imrt and vmat peripheral dose measurements. *Radiotherapy and Oncology*, 115 :S743.
- [Preston *et al.*, 2003] Preston, D., Shimizu, Y., Pierce, D., Suyama, A., and Mabuchi, K. (2003). Studies of mortality of atomic bomb survivors. report 13 : Solid cancer and noncancer disease mortality : 1950–1997. *Radiation research*, 160 :381–407.
- [Purdy, 2008] Purdy, J. (2008). Dose to normal tissues outside the radiation therapy patient's treated volume : A review of different radiation therapy techniques. *Health physics*, 95 :666–76.
- [Ramsey, 2006] Ramsey, C. (2006). Out-of-field dosimetry measurements for a helical tomotherapy system. *Journal of Applied Clinical Medical Physics*, 7.
- [Reft *et al.*, 2006] Reft, C., Runkel-Muller, R., and Myriantopoulos, L. (2006). In vivo and phantom measurements of the secondary photon and neutron doses for prostate patients undergoing 18 mv imrt. *Medical physics*, 33 :3734–42.
- [Rehman *et al.*, 2018] Rehman, J., Khan, m. i., Ahmad, N., Nasar, G., Khan, M., Gilani, Z., Chow, J., Afzal, M., and Ibbott, G. (2018). Dosimetric, radiobiological and secondary cancer risk evaluation in head-and-neck three-dimensional conformal radiation therapy, intensity-modulated radiation therapy, and volumetric modulated arc therapy : A phantom study. *Journal of medical physics*, 43 :129–135.
- [Ribberfors and Berggren, 1982] Ribberfors, R. and Berggren, K. F. (1982). Incoherent-x-ray-scattering functions and cross sections $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{incoh}}$ by means of a pocket calculator. *Phys. Rev. A*, 26 :3325–3333.
- [Rogers, 2006] Rogers, D. W. O. (2006). Fifty years of monte carlo simulations for medical physics. *Physics in Medicine and Biology*, 51(13) :R287–R301.
- [Ross, 2019] Ross, S. (2019). *Introduction to Probability Models (12th edition)*. Elsevier, Inc.
- [Ruben *et al.*, 2011] Ruben, J. D., Lancaster, C. M., Jones, P., and Smith, R. L. (2011). A comparison of out-of-field dose and its constituent components for intensity-modulated radiation therapy versus conformal radiation therapy : Implications for carcinogenesis. *International Journal of Radiation Oncology*Biophysics*, 81(5) :1458 – 1464.

- [Saini and Zhu, 2007] Saini, A. and Zhu, T. (2007). Energy dependence of commercially available diode detectors for in-vivo dosimetry. *Medical physics*, 34 :1704–11.
- [Salminen *et al.*, 1995] Salminen, E., Pukkala, E., Teppo, L., and Pyrhönen, S. (1995). Risk of second cancers among lung cancer patients. *Acta oncologica (Stockholm, Sweden)*, 34 :165–9.
- [Salvat *et al.*, 2014] Salvat, F., Fernández-Varea, J., and Sempau, J. (2014). *PENELOPE-2014 : A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. Nuclear Energy Agency.
- [Salvat *et al.*, 1996] Salvat, F., Fernandez-Varea, J. M., Baro, J., and Sempau, J. (1996). Penelope, an algorithm and computer code for monte carlo simulation of electron-photon showers.
- [Sanchez *et al.*, 2015] Sanchez, B., El-Far, R., Irazola, L., Romero-Expósito, M., Lagares, J., Mateos, J., Terrón, J., and Sánchez-Doblado, F. (2015). Analytical model for photon peripheral dose estimation in radiotherapy treatments analytical model for photon peripheral dose estimation in radiotherapy treatments. *Biomedical Physics & Engineering Express*, 1 :045205.
- [Scarboro *et al.*, 2012] Scarboro, S., Followill, D., Kerns, J., White, R., and Kry, S. (2012). Energy response of optically stimulated luminescent dosimeters for non-reference measurement locations in a 6 mv photon beam. *Physics in medicine and biology*, 57 :2505–15.
- [Scarboro *et al.*, 2011] Scarboro, S. B., Followill, D. S., Howell, R. M., and Kry, S. F. (2011). Variations in photon energy spectra of a 6 mv beam and their impact on tld response. *Medical Physics*, 38(5) :2619–2628.
- [Schneider *et al.*, 2017] Schneider, C., Newhauser, W., Wilson, L., Schneider, U., Kaderka, R., Miljanic, S., Knežević, Ž., Stolarczyk, L., Durante, M., and Harrison, R. (2017). A descriptive and broadly applicable model of therapeutic and stray absorbed dose from 6 mv to 25 mv photon beams. *Medical Physics*, 44.
- [Schneider *et al.*, 2013] Schneider, U., Hälgl, R., Hartmann, M., Mack, A., Storelli, F., Joosten, A., Moeckli, R., and Besserer, J. (2013). Accuracy of out-of-field dose calculation of tomotherapy and cyberknife treatment planning systems : A dosimetric study. *Zeitschrift fur medizinische Physik*, 24.
- [Schneider *et al.*, 2006] Schneider, U., Lomax, A., Pемler, P., Besserer, J., Ross, D., Lombriser, N., and Kaser-Hotz, B. (2006). The impact of imrt and proton radiotherapy on secondary cancer incidence. *Strahlentherapie und Onkologie : Organ der Deutschen Röntgengesellschaft ... [et al]*, 182 :647–52.
- [Schneider and Walsh, 2008] Schneider, U. and Walsh, L. (2008). Cancer risk estimates from the combined japanese a-bomb and hodgkin cohorts for doses relevant to radiotherapy. *Radiation and environmental biophysics*, 47 :253–63.
- [Seltzer, 1995] Seltzer, S. (1995). Physics of etran and its electron-photon monte carlo codes. *Transactions of the American Nuclear Society*, 73.
- [Seltzer, 1991] Seltzer, S. M. (1991). Electron-photon monte carlo calculations : The etran code. *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part A. Applied Radiation and Isotopes*, 42(10) :917 – 941.
- [Seong *et al.*, 2016] Seong, K. M., Seo, S., Lee, D., Kim, M.-J., Lee, S.-S., Park, S., and Jin, Y. (2016). Is the linear no-threshold dose-response paradigm still necessary for the assessment of health effects of low dose radiation? *Journal of Korean Medical Science*, 31 :S10.

- [Shahban *et al.*, 2017] Shahban, M., Hussain, B., Mehmood, K., and Rehman, S. (2017). Estimation of peripheral dose from co 60 beam in water phantom measured in secondary standard dosimetry laboratory, pakistan. *Reports of Practical Oncology & Radiotherapy*, 22 :212–216.
- [Sharma *et al.*, 2006] Sharma, D., Animesh, Deshpande, S., Phurailatpam, R., Deshpande, D., Shrivastava, S. K., and Dinshaw, K. (2006). Peripheral dose from uniform dynamic multileaf collimation fields : Implications for sliding window intensity-modulated radiotherapy. *The British journal of radiology*, 79 :331–5.
- [Shepherd *et al.*, 1997] Shepherd, S. F., Childs, P. J., Graham, J. D., Warrington, A. P., and Brada, M. (1997). Whole body doses from linear accelerator-based stereotactic radiotherapy. *International Journal of Radiation Oncology*Biological*Physics*, 38(3) :657 – 665.
- [Sherazi and Kase, 1985] Sherazi, S. and Kase, K. R. (1985). Measurements of dose from secondary radiation outside a treatment field : Effects of wedges and blocks. *International Journal of Radiation Oncology*Biological*Physics*, 11(12) :2171 – 2176.
- [Smith *et al.*, 2010] Smith, M., Seibel, N., Altekruze, S., Ries, L., Melbert, D., O’Leary, M., Smith, F., and Reaman, G. (2010). Outcomes for children and adolescents with cancer : Challenges for the twenty-first century. *Journal of clinical oncology : official journal of the American Society of Clinical Oncology*, 28 :2625–34.
- [Snow *et al.*, 2013] Snow, J., Micka, J., and Dewerd, L. (2013). Microionization chamber air-kerma calibration coefficients as a function of photon energy for x-ray spectra in the range of 20-250 kvp relative to co-60. *Medical physics*, 40 :041711.
- [Stathakis *et al.*, 2007] Stathakis, S., Li, J., and Ma, C.-M. C. (2007). Monte carlo determination of radiation induced cancer risks for prostate imrt patients. *Journal of Applied Clinical Medical Physics - J APPL CLIN MED PHYS*, 8.
- [Stern, 1999] Stern, R. L. (1999). Peripheral dose from a linear accelerator equipped with multileaf collimation. *Medical Physics*, 26(4) :559–563.
- [Stovall, 1995] Stovall, M. (1995). Fetal dose from radiotherapy with photon beams : Report of aapm radiation therapy committee task group no. 36. *Medical Physics*, 22 :63.
- [Stratton *et al.*, 2009] Stratton, M., Campbell, P., and Futreal, P. (2009). The cancer genome. *Nature*, 458 :719–24.
- [T. E. Booth and McCready, 2009] T. E. Booth, K. C. K. and McCready, S. S. (2009). Monte carlo variance reduction using nested dxtran spheres. *Nuclear Technology*, 168(3) :765–767.
- [Taddei *et al.*, 2013] Taddei, P., Jalbout, W., Howell, R., Khater, N., Geara, F., Homann, K., and Newhauser, W. (2013). Analytical model for out-of-field dose in photon craniospinal irradiation. *Physics in medicine and biology*, 58 :7463–7479.
- [Taylor and Powell, 2004] Taylor, A. and Powell, M. (2004). Intensity-modulated radiotherapy - what is it? *Cancer imaging : the official publication of the International Cancer Imaging Society*, 4 :68–73.
- [Teoh *et al.*, 2011] Teoh, M., Clark, C., Wood, K., Whitaker, S., and Nisbet, A. (2011). Volumetric modulated arc therapy : A review of current literature and clinical use in practice. *The British journal of radiology*, 84 :967–96.
- [Thomas E. Booth and Martz, 2011] Thomas E. Booth, R. A. F. and Martz, R. L. (2011). Mcnp variance reduction developments in the 21st century. *Nuclear Technology*, 180(3) :355–371.

- [Tomasetti *et al.*, 2017] Tomasetti, C., Li, L., and Vogelstein, B. (2017). Stem cell divisions, somatic mutations, cancer etiology, and cancer prevention. *Science*, 355(6331) :1330–1334.
- [Travis *et al.*, 2003] Travis, L., Hill, D., Dores, G., Gospodarowicz, M., Leeuwen, F., Glimelius, B., Andersson, M., Wiklund, T., Lynch, C., Veer, M., Glimelius, I., Storm, H., Pukkala, E., Stovall, M., Curtis, R., Boice, J., and Gilbert, E. (2003). Breast cancer following radiotherapy and chemotherapy among young women with hodgkin disease. *JAMA : the journal of the American Medical Association*, 290 :465–75.
- [Tubiana, 2009a] Tubiana, M. (2009a). Can we reduce the incidence of second primary malignancies occurring after radiotherapy? a critical review. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 91 :4–15 ; discussion 1.
- [Tubiana, 2009b] Tubiana, M. (2009b). Prevention of cancer and the dose-effect relationship : The carcinogenic effects of ionizing radiations. *Cancer radiothérapie : journal de la Société française de radiothérapie oncologique*, 13 :238–58.
- [Tukenova *et al.*, 2010] Tukenova, M., Guibout, C., Oberlin, O., Doyon, F., Mousannif, A., Haddy, N., Guérin, S., Pacquement, H., Aouba, A., Hawkins, M., Winter, D., Bourhis, J., Lefkopoulos, D., Diallo, I., and de Vathaire, F. (2010). Role of cancer treatment in long-term overall and cardiovascular mortality after childhood cancer. *Journal of clinical oncology : official journal of the American Society of Clinical Oncology*, 28 :1308–15.
- [van den Heuvel *et al.*, 2012] van den Heuvel, F., Defraene, G., Crijns, W., and Bogaerts, R. (2012). Out-of-field contributions for imrt and volumetric modulated arc therapy measured using gafchromic films and compared to calculations using a superposition/convolution based treatment planning system. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 105 1 :127–32.
- [van Leeuwen *et al.*, 1993] van Leeuwen, F. E., Stiggelbout, A. M., van den Belt-Dusebout, A. W., Noyon, R., Eliel, M. R., van Kerkhoff, E. H., Delemarre, J. F., and Somers, R. (1993). Second cancer risk following testicular cancer : a follow-up study of 1,909 patients. *Journal of Clinical Oncology*, 11(3) :415–424. PMID : 8445415.
- [Verellen and Vanhavere, 2000] Verellen, D. and Vanhavere, F. (2000). Risk assessment of radiation-induced malignancies based on whole-body dose equivalent estimates for imrt in the head and neck region. *Radiotherapy and oncology : journal of the European Society for Therapeutic Radiology and Oncology*, 53 :199–203.
- [Verhaegen and Seuntjens, 2003] Verhaegen, F. and Seuntjens, J. (2003). Monte carlo modelling of external radiotherapy photon beams. *Physics in Medicine and Biology*, 48(21) :R107–R164.
- [Vlachopoulou *et al.*, 2011] Vlachopoulou, V., Antypas, C., Delis, H., Tzouras, A., Salvaras, N., Kardamakis, D., and Panayiotakis, G. (2011). Peripheral doses in patients undergoing cyberknife treatment for intracranial lesions. a single centre experience. *Radiation oncology (London, England)*, 6 :157.
- [von Neumann, 1951] von Neumann, J. (1951). Various techniques used in connection with random digits. In Householder, A. S., Forsythe, G. E., and Germond, H. H., editors, *Monte Carlo Method*, volume 12 of *National Bureau of Standards Applied Mathematics Series*, chapter 13, pages 36–38. US Government Printing Office, Washington, DC.

- [Wang and Xu, 2007] Wang, B. and Xu, X. G. (2007). Measurements of non-target organ doses using MOSFET dosimeters for selected IMRT and 3D CRT radiation treatment procedures. *Radiation Protection Dosimetry*, 128(3) :336–342.
- [Weintraub *et al.*, 2010] Weintraub, N., Jones, K., and Manka, D. (2010). Understanding radiation-induced vascular disease. *Journal of the American College of Cardiology*, 55 :1237–9.
- [Williamson *et al.*, 1984] Williamson, J. F., Deibel, F. C., and Morin, R. L. (1984). The significance of electron binding corrections in monte carlo photon transport calculations. *Physics in Medicine and Biology*, 29(9) :1063–1073.
- [X-5 Monte Carlo Team, 2003] X-5 Monte Carlo Team (2003). *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I : Overview and Theory*. LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory.
- [Xu *et al.*, 2008] Xu, X. G., Bednarz, B., and Paganetti, H. (2008). A review of dosimetry studies on external-beam radiation treatment with respect to second cancer induction. *Physics in Medicine and Biology*, 53(13) :R193–R241.
- [Zytkovicz *et al.*, 2007] Zytkovicz, A., Daftari, I., Phillips, T., Chuang, C., Verhey, L., and Petti, P. (2007). Peripheral dose in ocular treatments with cyberknife and gamma knife radiosurgery compared to proton radiotherapy. *Physics in medicine and biology*, 52 :5957–71.

Titre: Calcul accéléré de la dose périphérique en radiothérapie

Mots clés: Radiothérapie, Dose périphérique, Simulation Monte Carlo, Réduction de variance

Résumé: La radiothérapie représente l'un des principaux traitements dont bénéficient les patients atteints par un cancer. Elle n'est toutefois pas sans risque : les rayonnements ionisants utilisés pour détruire la tumeur peuvent favoriser l'apparition d'effets secondaires à long terme lorsqu'ils atteignent des régions éloignées de la zone traitée. On ne dispose aujourd'hui d'aucune méthode efficace pour connaître à l'avance cette dose périphérique, qui n'est alors pas incluse dans la planification du traitement. Notamment, la simulation Monte Carlo, reconnue pour sa précision dans le domaine, est limitée par l'important temps de

calcul nécessaire. Ce travail se concentre sur l'étude puis l'implémentation dans un code de simulation Monte Carlo d'une méthode de réduction de variance, destinée à accélérer les estimations de la dose périphérique. Cette méthode, dite du «transport pseudo-déterministe», permet de créer de nouvelles particules qui sont amenées artificiellement dans la région où la dose est estimée, permettant de réduire la variance sur le résultat. Elle est implémentée dans le code Phoebe, accompagnée d'autres techniques simples qui comblent certaines de ses lacunes. L'outil ainsi créé est ensuite validé numériquement et expérimentalement, puis appliqué à un cas concret de modélisation en radiothérapie.

Title: Accelerated peripheral dose calculation for radiotherapy

Keywords: Radiotherapy, Peripheral dose, Monte Carlo simulation, Variance reduction

Abstract: Radiotherapy is currently one of the main treatment modalities for cancer. However, it is not without risk : ionising radiation used to destroy tumors may promote the appearance of long-term side effects when particles reach areas far from the treatment beam. To date, there is no efficient method for predicting this peripheral dose of radiation, which is therefore not included in treatment planning. The Monte Carlo simulation method, known for its precision in dosimetry studies, is heavily limited by the computing time required. This work focuses on the study and then the implementa-

tion of a variance reduction method designed to speed up the peripheral dose estimates. This method, known as «pseudo-deterministic transport», allows the creation new particles that are artificially brought to the area of interest where the dose is estimated, thus reducing the variance on the estimation. This method is implemented in the simulation code Phoebe, along with some other simple techniques helping with its drawbacks. The tool created is then validated by comparison with results obtained with no variance reduction, and then applied to a concrete case of modeling in radiotherapy.

