

PTRAN 코드를 이용한 양성자선에 대한 물 흡수선량의 해석

원광대학병원 방사선종양학과, *군산대학교 물리학과

정동혁 · 김진영*

본 연구에서는 PTRAN 전산코드를 사용하여 양성자에 대한 물 흡수선량의 분포를 계산하였다. 먼저 양성자와 물과의 상호작용에 대하여 정리하고 흡수선량의 계산과정에 대하여 기술하였다. 또한 PTRAN의 수송 알고리즘, 파일구조, 그리고 실행방법을 제시하였다. 본 결과에서는 양성자 에너지 60, 100, 150, 200, 250 MeV에 대하여 양성자에 의한 물 흡수선량의 분포가 쿨롱 상호작용과 핵반응의 합으로 주어지며, 브레그 봉우리의 형태가 에너지손실의 통계적 성질과 다중산란에 의존함을 보였다. 본 연구를 통하여 양성자에 대한 물흡수선량의 구조 해석에 PTRAN 코드가 유용함을 알 수 있었다.

중심단어: 양성자선, 흡수선량, PTRAN 코드

서 론

물 속을 진행하는 고에너지 양성자에 대하여 다양한 상호작용들의 관점에서 흡수선량의 분포를 해석하는 것은 방사선치료의 물리분야 연구에 있어서 중요하다. 물에 입사한 양성자는 진행경로를 따라 물 속의 궤도전자들 그리고 핵들과 상호작용하면서 연속적으로 에너지를 잃으며 주어진 비정(range)에 도달한다. 이때 하전입자의 에너지손실은 속도의 제곱에 반비례하기 때문에 양성자는 정지할 무렵 다량의 에너지를 물질에 전달하며, 하전입자의 편향은 질량에 반비례하기 때문에 양성자의 측방향 산란은 매우 적다.^{1,2)} 이러한 결과로 양성자로 인한 깊이 흡수선량 분포상의 브레그 봉우리(Bragg peak)는 방사선치료의 측면에서 매우 이상적인 선량분포의 형태라고 할 수 있다.³⁾

양성자치료는 현재 국내에서는 시행되고 있지 않으나 최근 사이클로트론과 선형가속기의 건설이 국가차원에서 추진 중에 있어 양성자치료는 현실화 단계에 있다.⁴⁾ 따라서 현 시점에서 양성자의 물질과의 상호작용을 이론적으로 고찰하고 물의 에너지흡수에 대하여 논의하는 것은 양성자치료의 물리적 과정을 이해하기 위하여 필요하다고 할 수 있다.

PTRAN (Proton TRANsport)은 1993년 Berger⁵⁾에 의하여

개발된 양성자 수송코드이다. PTRAN은 에너지 50~255 MeV 범위의 양성자에 대하여 물 속 수송을 다루기 때문에 양성자치료의 물리분야 연구에 있어서 매우 유용한 코드라고 할 수 있다. 본 연구에서는 양성자의 상호작용에 대한 기술과 함께 PTRAN 코드에 대하여 정리하고 이를 이용하여 60, 100, 150, 200, 250 MeV 양성자에 대하여 깊이 흡수선량의 분포를 계산하였다. 본 논문의 재료 및 방법에서는 양성자의 물과의 상호작용과 흡수선량의 계산에 대하여 정리하고 PTRAN 전산코드의 수송 구조와 파일체계 및 실행 방법에 대해서 설명하였다. 결과에서는 각 에너지 양성자에 대하여 깊이 흡수선량 분포의 계산결과를 제시하였으며 상호작용들이 계산결과에 미치는 영향의 관점에서 결과를 설명하였다.

재료 및 방법

1. 양성자의 물질과의 상호작용

물질 속을 진행하는 양성자의 물질과의 상호작용은 에너지손실과 다중산란의 관점에서 논의된다. 양성자는 물질의 궤도전자와 핵들에 의한 전기적 쿨롱힘(Coulomb force)을 받으면서 연속적으로 운동 에너지를 손실하며 손실된 에너지는 대부분 전자들의 여기와 이온화에 소모된다. 이러한 쿨롱 상호작용에 의한 양성자의 단위 진행 길이당의 평균적 에너지손실은 저지능(stopping power)으로 주어진다.^{1,2,5,6)} 또한 양성자는 핵과의 충돌과정에서 핵 속으로 흡수될 수 있는데, 이때 양성자의 초기 운동에너지는 핵에 모두 전달되어 양성자, 중성자, 알파입자, 감마선, 분열파편들과 같은

이 논문은 2004년 7월 26일 접수하여 2004년 8월 19일 채택되었음.
책임저자 : 정동혁, (570-711) 전북 익산시 신용동 344-2
원광대학병원 방사선종양학과
Tel: 063)850-1526, Fax: 063)850-1528
E-mail: physics@wmc.wonkwang.ac.kr

이차입자들의 발생에 기여하며, 발생한 이차입자들은 또한 물질의 에너지흡수에 기여한다.⁵⁾

양성자는 질량이 전자보다 약 1,800배 무거워서 전자들과의 역학적 및 전기적 충돌시 거의 편향되지 않지만 핵과의 단일충돌에서 큰 각으로 산란할 수 있다. 이러한 양성자의 산란각 분포는 다중산란(multiple scattering) 이론⁷⁾으로 주어진다.

양성자의 수송에서는 이러한 물질과의 상호작용들을 가능한 고려하여 관심의 물리량들을 계산한다. 여기서 양성자의 수송문제에서 고려해야 하는 주요 요소들에 대하여 정리하면 다음과 같다.

(1) 양성자의 쿨롱힘에 의한 에너지의 손실은 Bethe 공식⁶⁾ 또는 ICRU-49 자료들⁸⁾로부터 계산할 수 있다. 일반적으로 양성자의 에너지손실은 속도의 제곱에 반비례하는 특성을 가진다. 그러나 이 값들은 단위 길이당의 평균적 에너지손실을 의미하므로 보다 정확한 계산을 위해서는 에너지손실의 통계적 요동(energy loss straggling)을 고려해야 한다.^{9,10)} 만약 이를 고려하지 않으면 브레그 봉우리의 계산에서 상당한 차이를 보일 수 있다.

(2) 양성자의 방향변화는 다중산란 이론들을 이용하여 계산할 수 있다. 일반적으로 양성자의 방향변화는 작은각 근사($\sin \theta \approx \theta$)를 이용하면 근사적으로 가우시안(gaussian) 분포를 따르지만 보다 정확한 계산을 위해서는 큰각 산란 즉, 단일산란(single scattering)을 고려해야 한다.⁷⁾

(3) 양성자에 대한 물 흡수선량의 계산은 여기와 이온화 및 핵반응에 의한 에너지전달 그리고 흡수에 의한 플루언스의 감쇠를 고려해야 한다. 여기서 핵반응에 의한 물의 에너지흡수는 에너지의 함수로서 핵반응 단면적(reaction cross section)으로부터 계산할 수 있다.⁵⁾ Paganetti (2002)¹¹⁾의 연구에 의하면, 160 MeV 양성자의 경우에 일차선의 약 19.6%가 핵반응을 일으키는데 매 핵반응시 평균적으로 이차 양성자 1.8, 중성자 0.68, α 입자 0.38, ^2H 0.02, ^3H 0.002, ^3H 0.001개의 이차입자가 발생하는 것으로 나타났다. 따라서 흡수선량의 계산에서 이차 하전입자들이 발생점에서 바로 흡수되는 것으로 간주하고 핵반응 단면적을 적용할 수 있으나 중성자는 원거리까지 물질과 상호작용할 수 있으므로 정확한 계산을 위해서는 중성자에 의한 효과를 보정해야 할 것이다.

2. 양성자에 대한 물 흡수선량

앞서 논의된 바와 같이 물 속을 진행하는 양성자에 의한 물 흡수선량은 여기와 이온화 그리고 핵반응에 의한 기여

의 합으로서 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$D_{Total} = D_c + D_n \quad (1)$$

여기서 D_c 는 양성자와 궤도전자 및 핵과의 쿨롱 상호작용에 의한 흡수선량을 의미하며, D_n 은 비탄성적인 핵반응에 의한 흡수선량을 의미한다. 물질내 관심점에서 양성자의 쿨롱 상호작용에 의하여 손실된 에너지가 궤도전자와 핵들에게 분배되는 것으로 간주하면 이들의 이차적 기여는 무시할 수 있으며, 물질이 흡수한 에너지는 양성자의 손실된 에너지와 동일하다. 따라서 D_c 는 질량 저지능(mass stopping power) S/ρ 을 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$D_c = \int_0^{E_{max}} \Psi_E(S/\rho) dE, \quad (2)$$

여기서 Ψ_E 는 양성자 선속의 에너지에 대한 미분분포로서 ΨdE 는 관심점을 통과하는 에너지 E 와 $E+dE$ 사이를 가지는 단위 면적당의 양성자의 수와 같다. 따라서 적분은 관심점에서 양성자의 모든 에너지분포에 대하여 수행됨을 의미한다. 이 식에서 저지능 S/ρ 는 물질속 전자들에 의한 기여(electronic stopping power)과 핵들에 의한 기여(nuclear stopping power)의 합으로 주어지는데($S/\rho = S_{el}/\rho + S_{N}/\rho$), 일반적으로 후자의 기여는 매우 낮다. Fig. 1에 양성자 에너지의 함수로서 저지능과 CSDA 비정(continuous slowing down approximation range)을 나타냈다.

(1)식에서 D_n 은 핵반응으로 발생하는 이차입자들에 의한 흡수선량을 의미하는데, D_n 의 수학적 표현은

$$D_n = \int_0^{E_{max}} C \Psi_E E \frac{\mu}{\rho} dE \quad (3)$$

이다. 여기서 μ 는 $\mu \equiv n\sigma$ 로 정의되는 핵감쇠계수(nuclear attenuation factor)이다.⁵⁾ μ 의 물리적 의미는 물질속에서 양성자의 단위 길이당 핵반응의 확률과 같다. 여기서 n 은 물질의 원자밀도, σ 는 에너지에 의존하는 비탄성 핵반응 단면적(inelastic nuclear reaction cross-section)이다. 물에 대하여 σ 는 산소핵과 수소핵에 대한 단면적의 합으로 주어지는데 일반적으로 수소핵에 의한 기여는 무시하며 산소핵에 대해서만 고려한다. Fig. 2에 양성자 에너지의 함수로서 핵감쇠계수 μ 를 보였는데, 여기서 표시된 점들은 실험으로부터 결정된 값들이며,¹²⁾ 표시된 선은 PTRAN 코드에서 사용하는 맞춤자료(fitted data)이다. 위 식에서 C 는 앞서 언급한 이차 중성자의 발생에 대한 보정인자이다. 이 값은 에너지에 의존하지만 근사적으로 0.6과 같은데,^{13,14)} 다음 절에서 다시 논의된다. 다음은 PTRAN 몬테칼로 코드를 소개하고 이 코드에서 양성자의 물리적 상호작용들을 다루는 과정과 물 흡수선량을 계산하는 과정을 요약하여 기술한다.

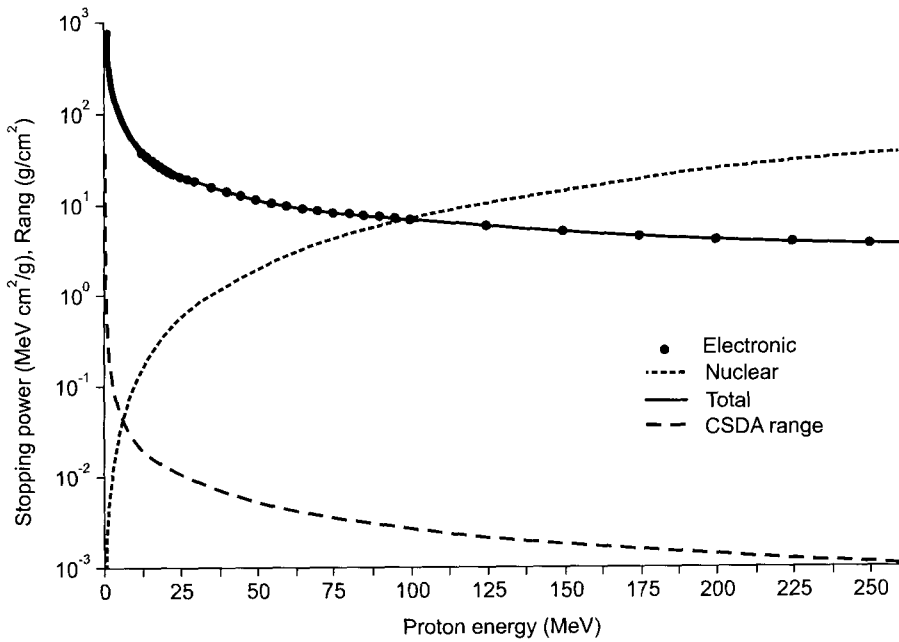


Fig. 1. Stopping powers (electronic, nuclear, total) and CSDA ranges for proton beam in water.

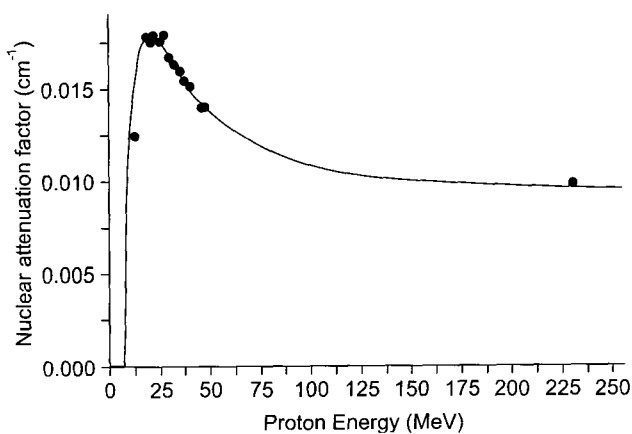


Fig. 2. Nuclear attenuation factor for proton beam in water. Symbols are experimental results given in the atomic table and the line is a fitted curve by PTRAN.

3. PTRAN 코드의 계산구조

PTRAN은 Berger (1993)에 의하여 개발된 양성자 몬테칼로 수송 코드이다.⁵⁾ PTRAN에서는 물속에 입사하는 50~255 MeV 양성자에 대하여 몬테칼로 수송을 통한 물의 에너지흡수를 다룬다. PTRAN의 몬테칼로 계산은 condensed-random-work 모델에 기초하는데, 물에 입사하는 고속 양성자에 대하여 스텝(step)이라고 부르는 매우 짧은 경로를 취하고 각 스텝에 대하여 에너지손실과 다중산란을 적용하여

에너지와 방향변화를 반복적으로 계산하여 에너지가 사전에 정한 하한값에 도달할 때까지 양성자의 경로를 추적한다. PTRAN 코드의 최종 결과는 물 속 깊이의 함수로서 단위 길이당의 흡수선량의 분포로 주어진다.

PTRAN에서 사용하는 저지능 자료는 Fig. 1과 같다. 이 자료는 Berger (1992)가 개발한 저지능 계산코드인 PSTAR¹⁵⁾의 결과이며 또한 ICRU-49 (1992)⁸⁾의 자료와 동일하다. 이때 양성자의 에너지손실은 충돌과정의 통계적 요동, 즉 에너지손실 straggling으로 인하여 일정한 분포를 가지므로,^{9,10)} PTRAN에서는 이를 고려하기 위하여 Vavilov¹⁰⁾의 이론을 도입하여 에너지손실을 계산한다.

Vavilov¹⁰⁾에 의하면 에너지손실의 통계적 특성은 전자와 단일 충돌에서 최대 에너지 손실량(E_M)과 평균적 손실량(ξ)의 비, $k = \xi/E_M$ 에 의존하는데, k 가 큰 경우에는 가우시안(Gaussian) 분포를 따르며, k 가 작은 경우에는 란다우(Landau) 분포¹⁰⁾를 따른다. 이는 양성자 에너지가 낮거나 두꺼운 물질의 경우에 에너지손실은 가우시안 분포를 따르며, 에너지가 높거나 얇은 물질의 경우에는 란다우 분포를 따른다는 것과 같은 의미이다.

PTRAN에서는 에너지의 함수로 사전에 ξ , k , 및 Δt 를 계산하고 이들을 Vavilov 분포함수에 대입하여 에너지손실을 결정하는데, 이때 Vavilov 이론을 적용하여 결정된 에너지손실은 다음과 같은 형태이다.

$$\Delta = \bar{\Delta} + \xi(\lambda - \bar{\lambda}) \quad (4)$$

여기서 $\bar{\Delta}$ 는 평균적 에너지 손실량이며, λ 와 $\bar{\lambda}$ 는 Vavilov 분포함수로부터 표본추출되는 에너지손실 환산변수들(scaled energy loss variables)이다. 따라서 이 식의 우변에서 첫째 항은 평균에너지 손실항이며 둘째 항은 통계적 요동(straggling)에 대한 고려이다. 그러므로 초기에너지 E 인 양성자의 에너지손실이 Δ 로 결정되면 나중에너지는, $E' = E - \Delta$ 이다. PTRAN에서 이 과정은 에너지가 사전에 정한 하한 에너지(코드에서는 EFIN이라고 함)에 도달할 때까지 반복된다.

양성자의 수송과정에서 취해지는 방향변화는 Moliere의 다중산란 이론⁷⁾으로부터 계산한다. 임의의 짧은 경로(Δs)를 진행한 양성자의 다중산란각 θ 에 대한 Moliere의 분포함수는 다음과 같은데,

$$F(\theta)\theta d\theta = \theta d\theta \left[e^{-\theta^2} + \frac{f^{(1)}}{B} + \frac{f^{(2)}}{B^2} + \dots \right], \quad (5)$$

여기서 θ 는 분포함수의 환산각(reduced angle) 변수로서, $\theta = \theta/(\chi\sqrt{E})$ 이다. 이때 χ 와 B 는 물질과 에너지 그리고 스텝거리 Δs 에 의존한다. 이 식에서 우변의 지수함수는 일반적인 가우시안 분포를 의미하며, 이후로 전개되는 함수들($f^{(1)}, f^{(2)}, \dots$)은 θ 의 함수로서 단일산란에 대한 보정항이다.

PTRAN에서는 분포함수로부터 θ 를 먼저 표본추출하고 θ 를 계산하며, 방위각 ϕ 는 0-2 π 범위에서 무작위(random)로 결정한다. θ 와 ϕ 가 결정되면 회전행렬을 이용하여 미소변위, $\Delta \vec{r} = R(\theta, \phi)\Delta s \hat{r}$ 을 계산하고, 이로부터 최종 변위를, $\vec{r}' = \vec{r} + \Delta \vec{r}$ 와 같이 계산한다. 여기서 $R(\theta, \phi)$ 는 회전행렬, Δs 는 스텝거리, \vec{r} 과 \vec{r}' 은 변위의 전과 후의 좌표를 나타내는 벡터이며, 마지막으로 \hat{r} 은 \vec{r} 의 단위벡터(또는 방향코사인)이다.

PTRAN에서 물 흡수선량의 계산은 사전에 입력된 깊이 구간에 대하여 각 깊이 구간에서 에너지의 함수로서 단위 두께(g/cm²)당의 평균적 에너지흡수, dD/dz (MeV cm²/g)를 계산한다. 이 계산에서는 다음과 같이 여기와 이온화 그리고 핵반응에 의한 에너지흡수와 일차선 플루언스의 감쇠를 고려한다.

$$\left(\frac{dD}{dz} \right)_Z = W_E \left[\frac{S(E)}{\rho} + \frac{E\mu(E)}{\rho} \right]_Z \quad (6)$$

여기서 S 는 깊이 Z 에서 에너지의 함수로서 저지능이며, ρ 는 물의 밀도이다. μ 는 핵감쇠계수인데, PTRAN에서는 Renberg,¹⁶⁾ Carlson 등,¹⁷⁾ 그리고 Young 등¹⁸⁾의 이론적 및 실험적 연구로 결정된 양성자와 산소핵과의 핵반응 단면적

자료를 사용한다(Fig. 2 참조). 이 식에서 $E\mu$ 는 통계적 관점에서 핵반응에 의하여 단위길이당 손실되는 에너지와 같으며, 이를 비탄성 핵저지능(inelastic nuclear stopping power)이라고 한다.⁵⁾ 마지막으로 이 식에서 W_E 는 다음과 같이 정의되는 생존인자(survival factor)이다.

$$W_E = \exp\left[-\int_{E_0}^E \mu ds\right] \quad (7)$$

이 식에서 우변의 적분은 μ 의 에너지의존성을 고려한다. 그리고 적분 $\int_{E_0}^E ds$ 는 초기에너지 E_0 인 양성자가 에너지 E 에 도달할 때까지의 총 진행거리와 같다. 따라서 W_E 의 물리적 의미는 양성자가 에너지 E 가 될 때까지 흡수되지 않을 확률과 같다. PTRAN에서 생존인자의 도입은 핵반응시 양성자의 흡수로 인한 플루언스의 감쇠를 보정함을 의미하며 또한 계산결과와 통계적 요동을 줄이기 위한 기법으로도 해석된다.

지금까지 나열한 PTRAN에서 양성자의 수송과정은 상호작용의 측면에서 다음과 같이 정리된다.

- (1) 양성자 에너지의 변화는 Vavilov 이론으로부터 에너지손실의 통계적 요동을 고려하여 결정한다.
- (2) 다중산란각의 계산은 Moliere 이론으로부터 가우시안 분포 및 단일산란 분포를 고려하여 결정한다.
- (3) 흡수선량은 먼저 쿨롱 상호작용과 핵반응에 의한 에너지흡수를 결정하고 여기에 에너지와 총 이동경로의 함수로서 생존인자를 곱하여 결정한다.

이와 같이 PTRAN의 수송체계는 대부분 앞 절에서 제시한 고려사항을 따르고 있다. 그렇지만 흡수선량의 계산에서 핵반응에 의한 이차 중성자의 발생을 보정하지 않는 점을 지적할 수 있다.¹¹⁾ PTRAN 코드의 발표 이후 Seltzer¹⁹⁾ 및 Berger²⁰⁾의 연구에 의하면 핵반응에 의하여 물질에 실제로 전달되는 비율은, 250~160 MeV에서 약 70%, 160~50 MeV에서 약 60%, 그 이하에서 약 40%로 나타났으며, 근사값으로 60%를 제시한 바 있다. 따라서 PTRAN 코드는 핵반응의 기여가 중요한 높은 에너지와 물의 표면영역에 대한 흡수선량의 계산에서 약간의 오차를 보일 것이다.

본 보고서에서는 이차 중성자에 의한 추가적 논의는 생략하며 단지 PTRAN 코드를 이용한 계산결과만을 제시할 것이다. 본 보고서의 결과에서는 초기 운동 에너지 60, 100, 150, 200, 250 MeV인 양성자선에 대하여, 핵반응과 에너지손실의 통계적 요동, 그리고 다중산란과 같은 주요 상호작용의 변수들이 물 흡수선량 및 깊이 흡수선량 분포에 미치는 영향의 관점에서 PTRAN 코드의 계산결과를 제시한다.

Table 1. File structure of the PTRAN code system, where j^* and files[†] are arbitrarily determined numbers and file names by the user.

Code name	Description	Input	Output
PARAM4.FOR	Calculate stopping powers, step sizes, nuclear attenuation factors, etc as a function of energy by interpolation of reference data	COMPOS.WAT STOPPING.WAT OXFIT.DAT	PARAM4.ARj* PARAM4.PTj
MPREP4.FOR	Calculate Moliere's multiple scattering distribution functions using input data files and results from output of PARAM4	MOLC1.COF MOLC2.COF THSET2 PARAM4.ARj PARAM4.ARj	MPREP4.ARj
VPREP4.FOR	Calculate Vavilov distribution functions using results from output of PARAM4	MPREP4.ARj	VPREP4.ARj
MCON4.FOR	Convert ASCII data into binary data for an output file from MPREP4	VPREP4.ARj	MPREP4.BRj
VCON4.FOR	Convert ASCII data into binary data for an output file from VPREP4	PARAM4.PTj GAUSS.DAT BDFILE [†]	MPREP4.BRj
PTRAN3D.FOR	Three dimensional Monte Carlo Transport and calculation of physical quantities using prepared data	PARAM4.PTj GAUSS.DAT BDFILE [†]	PTRAN3D.OUT [†]
PTSUM.FOR	Summary of output data from PTRAN3	PTRAN3D.OUT [†]	PTRAN3DT.SUM

4. PTRAN의 파일체계

PTRAN 전산코드는 NEA (Nuclear Energy Agency) 홈페이지(<http://www.nea.fr>) 또는 원자력연구소를 통하여 공급받을 수 있다. PTRAN은 상호작용에 대한 자료생성을 위한 3개의 주요 프로그램(PARAM4.FOR, MPREP4.FOR, VPREP4.FOR)과 몬테칼로 수송을 처리하는 PTRAN3D.FOR 그리고 결과를 정리하는 몇 개의 프로그램으로 구성되어 있는데, 이들의 명칭과 주요 기능을 Table 1에 수록하였다. 이외에도 일차원적 계산을 수행하는 PTRAN1D.FOR, PTPOL.FOR, PTGPOL.FOR 등과 계산된 결과로부터 커널을 구하여 측면 선량분포를 계산하는 FCIR.FOR, FREC.FOR 등의 응용 코드들이 PTRAN 시스템에 포함되어 있으나, 본 보고서에서는 단지 깊이 선량분포를 계산하기 위한 파일구조만을 다룬다.

Table 1에서 INPUT은 코드의 실행에 필요한 입력파일들이며 OUTPUT은 실행 후 출력되는 파일들이다. 이와 같이 PTRAN에서는 한 코드의 출력파일이 다른 코드의 실행시 입력파일로 사용됨을 알 수 있다. 그리고 Table 1에서 출력 파일들의 확장명에 붙은 j는 사용자가 임의로 정하는 번호이다.

Table 1에 주어진 소스코드들의 컴파일은 완료되고 Table 2의 목록이 준비된 경우에 PTRAN의 실행순서는 다음과 같이 정리된다.

Table 2. Description of the data files in the PTRAN code system.

File Name	Description
COMPOS.WAT	Composition data for water
STOPPING.WAT	Stopping power data for proton in water
OXFIT.DAT	Cross section data for nucleus of oxygen
MOLC1.COF	Calculated data for first distribution function in Moliere formula
MOLC2.COF	Calculated data for second distribution function in Moliere formula
THSET2	Data for reduced angles in Moliere theory
GAUSS.DAT	Calculated Gaussian distribution data
BDFILE	Boundary data as an input file of PTRAN3D.FOR

(1) PARAM4의 실행: 이 코드에서는 계산에 필요한 에너지범위를 정의하고 에너지의 함수로 저지능, 스텝길이, 핵감쇠계수 등을 내삽을 통하여 계산하며 결과를 PARAM4.PTj와 PARAM4.ARj의 파일에 저장한다.

(2) MPREP4의 실행: 이 코드에서는 PARAM4.ARj 파일에 저장된 에너지 표에 대하여 Moliere의 다중산란 분포함수를 계산하며 계산 결과를 MPREP4.ARj 파일에 저장한다.

(3) VPREP4의 실행: 이 코드에서는 (3)의 과정과 유사한데, Vavilov 에너지손실 분포함수를 계산하며 계산 결과를 VPREP4.ARj 파일에 저장한다.

```

[C:\] 명령 프롬프트 - PTRAN3D
C:\>code\WPTRAN >
C:\>code\WPTRAN >
C:\>code\WPTRAN >PTRAN3D
Enter NBEG and NFIN: 191, 573

Enter IHIST: 10000

Enter IMONIT: 10

Enter INRAN: 123456789

Enter BDFIL: BDFILE

Stragglng? <1=yes, 2=no>: 1

Angular multiple-scattering deflections? <1=yes, 2=no>: 1

Lateral multiple-scatt. displacements <1=yes, 2=no>: 1

Enter OUTPUT: PTRAN3D.OUT

Suggested file: PARAM4.PTj, where j indicates grid
Enter PDAT: PARAM4.PT7

Suggested file: VPREP4.BRj, where j indicates grid
Enter VDAT: VPREP4.BR7

Suggested file: MPREP4.BRj, Where j indicates grid
Enter MDAT: MPREP4.BR7
    
```

Fig. 3. An example of PTRAN3D code running.

(4) MCON4와 VCON4의 실행: 이 두 코드는 (2)와 (3)의 과정으로부터 각각 생성된 MPREP4.ARj와 VPREP4.ARj를 PTRAN3D의 실행을 위하여 이진파일로 변환시킨다. 이 때 변환된 파일명은 각각 MPREP4.BRj, VPREP4.BRj 이다.

(5) PTRAN3D의 실행: 이 코드는 지금까지의 결과들을 이용하여 몬테칼로 계산을 수행하여 결과를 생성한다. 이 코드의 실행을 위해서는 (1)~(4)의 과정에서 생성된 PARAM4.PTj, MPREP4.BRj, VPREP4.BRj의 파일들이 요구되며, 아울러 물의 깊이구간과 에너지분포 등을 정의하는 파일(이를 Boundary 파일이라고 함)이 사용자에게 의하여 사전에 작성되어야 한다.

Fig. 3은 PTRAN3D의 실행예제를 보여준다. 여기서 NBEG와 NFIN은 사전에 계획된 에너지목록에서 시작에너지와 끝에너지에 대한 번호, IHIST는 계산의 History를 의미하며, IMONIT는 History의 처리과정을 보기 위한 수, INRAN은 난수(random number) 발생을 위한 초기값, BDFIL은 Boundary 파일명이다. 이어서 수송과정에서 에너지손실 Stragglng, 다중산란, 측방향 변위의 고려여부에 대한 선택을 한다. 다음은 출력과 계산자료 파일명의 입력인데, OUTPUT에는 출력파일명을 입력하고 이어서 사전에 준비

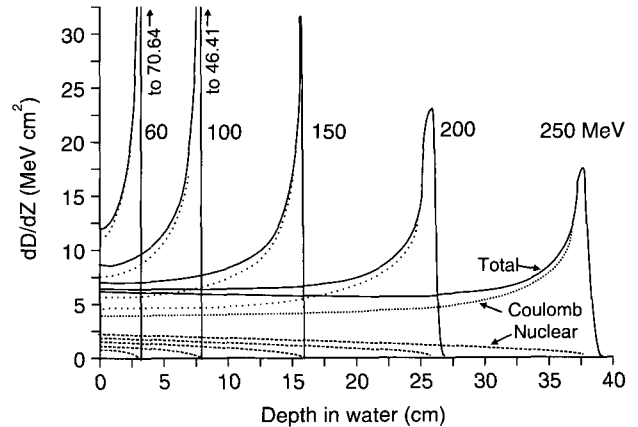


Fig. 4. Average absorbed energy per unit depth in terms of Coulomb interaction and the nuclear reaction for five energies of proton beam incident on the water.

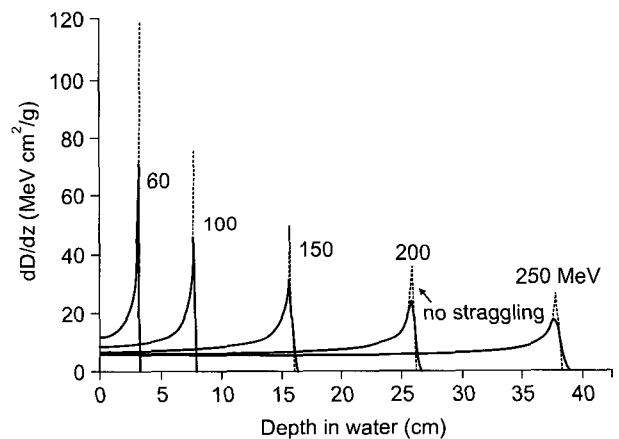


Fig. 5. Average absorbed energy per unit depth in terms of the energy-loss stragglng effect.

한 PARAM4.PTj, MPREP4.BRj, VPREP4.PTj의 파일명을 차례로 입력한다.

결 과

Fig. 4는 각 에너지에 대한 깊이의 함수로서 양성자 흡수선량의 분포인데, 쿨롱 상호작용과 핵반응의 기여를 분리하여 나타냈다. 이 결과에서 알 수 있듯이 핵반응은 전체 흡수선량에 크게 기여하지는 않지만 에너지가 높을수록 그리고 얇은 깊이일수록 핵반응의 기여가 더 크다는 것을 알 수 있다. 이 현상은 Fig. 1과 Fig. 2로부터 설명할 수 있는데, 양성자의 저지능은 에너지의 증가에 따라 낮은 반면 핵

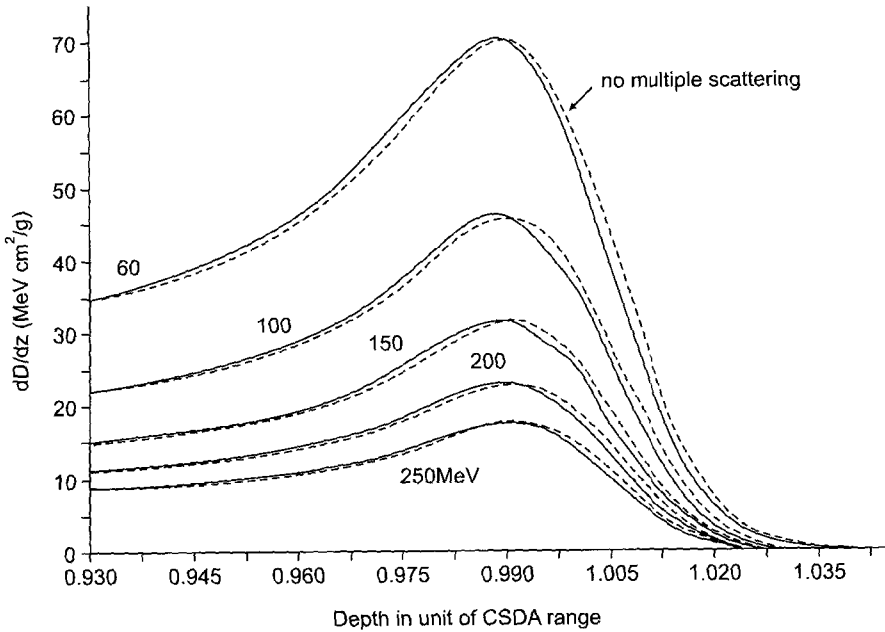


Fig. 6. Average absorbed energies per unit depth scaled by CSDA ranges in terms of the multiple scattering effect.

감쇠계수는 고에너지 영역에서 거의 일정하기 때문에 에너지가 높은 물 표면에서 핵반응의 비중은 높다.

한편, 이 그림에서 에너지가 높을수록 브레그 봉우리의 높이가 줄어드는 것을 알 수 있는데, 이는 핵반응에 의한 양성자 플루언스의 감쇠 때문이다. 즉, 에너지가 높을수록 도달거리가 길어지며 핵반응의 확률이 증가하므로 비정 근처에서 브레그 봉우리에 기여하는 양성자의 수가 감소하기 때문이다. 결과에서 양성자의 브레그 봉우리의 직선 길이는, 60, 100, 150, 200, 250 MeV에 대하여 3.06, 7.64, 15.62, 25.70, 37.56 cm로 나타났는데, 이는 Berger가 언급한 바와 같이 CSDA 비정의 99%점과 같다.⁵⁾

Fig. 5는 길이 흡수선량 분포 계산에 있어서 에너지손실의 통계적 성질에 대한 의존성을 보여준다. 이미 논의한 바와 같이 에너지손실의 straggling을 고려하지 않으면, 에너지손실이 일정한 것으로 간주되기 때문에 다중산란의 범위 내에서 거의 동일한 위치에서 정지하게 되므로 브레그 봉우리는 그림과 같이 매우 높게 계산된다.

Fig. 6은 몬테칼로 수송에서 다중산란 의존성을 보여준다. 이 그림에서 가로축은 CSDA 비정에 대하여 규격화되었다. 이 그림에서 점선으로 표시된 것은 다중산란을 무시했을 때의 결과인데, 이 결과에서 알 수 있듯이, 양성자 몬테칼로 계산에서 다중산란 의존성은 그다지 크지 않은 것으로 보이며, 다중산란을 무시하는 경우에 도달거리가 약간 증가하는 경향을 보인다.

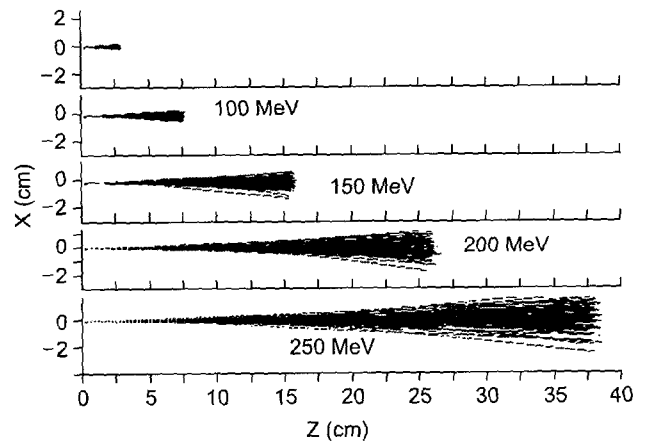


Fig. 7. Calculated proton tracks for 100 incident protons. In this calculation modified PTRAN3D.FOR code was used.

Fig. 7은 주어진 에너지의 양성자에 대하여 물에서의 진행 궤적을 보여준다. 이 그림의 값들은 정규적 PTRAN 코드에서는 출력되지 않기 때문에 본 연구에서 PTRAN3D.FOR 코드를 부분적으로 수정하여 얻은 결과이다. 이 그림은 수정된 코드를 이용하여 물 속으로 입사하는 100개의 양성자에 대한 궤적을 계산한 결과이다. 이 그림에서 주어진 에너지에서 양성자들은 대부분 동일한 깊이에서 정지하는 것을 알 수 있다. 여기서 도달거리의 미소한 차이들은 에너지손실 straggling과 다중산란의 영향 때문이다. 또한

측방향 산란은 높은 에너지에서 보다 큰 것을 알 수 있는데, 이는 원거리를 진행하는 동안에 다중산란의 누적으로 인하여 산란각 분포가 넓어지기 때문이다. 이 그림의 결과들은 물속에서 양성자의 궤적을 가지적으로 확인할 수 있어서 양성자의 물 속 수송에 대한 이해에 도움을 줄 수 있다.

결 론

본 보고서에서는 양성자의 물과의 상호작용을 논의하고 양성자에 대한 흡수선량의 기술방법을 제시하였다. 아울러 PTRAN 코드의 수송 알고리즘으로부터 파일구조와 실행에 제까지 정리하였는데, 이는 PTRAN 코드가 거의 소개되지 않았기 때문이며 추후 다양한 응용을 위해서이다. 또한 본 결과에서는 양성자의 물과의 상호작용들에 의한 효과가 깊이 흡수선량의 분포에 미치는 영향을 계산결과를 통하여 해석하였는데, 이로부터 양성자에 대한 물 흡수선량의 결정과 상호작용들의 기여에 대하여 쉽게 이해할 수 있었다. 본 결과에서는 계산결과들의 정량적 상호비교, 특정 값에 대한 규격화, 실험결과와의 비교 및 다른 코드의 결과와의 비교 등은 수행하지 않았으며, 단지 흡수선량 계산의 물리적 과정과 상호작용들이 흡수선량에 미치는 영향만을 진술하였는데, 이들은 후속 연구에서 수행할 예정이다.

PTRAN 전산코드는 단지 물에 대하여 양성자의 수송만을 계산할 수 있어서 비교적 단순하며 또한 포트란으로 작성되어 있어서 원시코드의 해석과 수정이 용이한 장점을 가지고 있다. 또한 물 흡수선량의 계산에 대한 기초 과정을 쉽게 이해할 수 있다는 점은 연구에 매우 유익한 도구라고 할 수 있다. 그렇지만 양성자치료의 관점에서 PTRAN 코드는 여러 물질구조에 대하여 계산이 어려우며, 기하구조가 단순하여 다양한 기하구조에서의 계산이 불가능한 점, 그리고 넓고 평행한 빔에 대해서만 다루고 있는 점으로 인하여 연구에 많은 제한을 가지고 있다. 또한 앞서 언급되었듯이 흡수선량의 계산에서 핵반응에 대한 보정이 미흡한 점도 들 수 있다. 이러한 특성을 극복하기 위해서 MCNPX,²¹⁾ GEANT,²²⁾ PETRA²³⁾와 같은 전산코드를 이용할 수 있음을 제안할 수 있다. 이러한 코드들은 취급이 어려운 측면이 있으나, 다양한 기하구조의 입출력이 가능하며 다양한 입자들의 수송이 고려되므로 보다 다양한 연구결과를 산출할 수 있을 것이다.

양성자치료는 이온빔치료와 함께 국외 30여개의 기관에서 시행 중에 있으며, 세기조절치료를 위한 다양한 계산기

법들도 점차 체계화되고 있다.²⁴⁻²⁷⁾ 국내에서도 정부계획에 따라 수년 안에 양성자치료용 가속기가 가동될 예정이므로, 양성자에 대한 선행 연구는 중요하다고 생각하며 실용적인 연구의 도구로서 전산코드의 사용을 권고할 수 있다.

참 고 문 헌

1. Heitler W: The Quantum Theory of Radiation 3rd ed. Clarendon Press(1954), pp. 367-387
2. Bethe HA, Ashkin J: Passage of Radiations through Matter; Segre E : Experimental Nuclear Physics Vol. I. John Wiley & Sons, New York(1953), pp. 166-357
3. Dyk JV: The Modern Technology of Radiation Oncology. Medical Phys Publishing, Madison WI(1999), pp. 824-825
4. Web sites: <http://www.ncc.re.kr/> and <http://www.most.go.kr>
5. Berger MJ: Proton Monte Carlo transport program PTRAN, National Institute of Standards and Technology Report NISTIR-5113 (1993)
6. Attix FH: Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry. John Wiley & Sons, New York, pp. 160-170 (1986)
7. Bethe HA: Moliere's theory of multiple scattering. Phys Rev 89:1256-1266 (1953)
8. ICRU Report 49: Stopping power and ranges for protons and alpha particles. Bethesda, MD (1993)
9. Hilbert JW, Baily NA, Lane RG: Statistical fluctuations of energy deposited in low-atomic-number materials by 43.7 MeV protons. Phys Rev 168:290-293 (1968)
10. Vavilov PV: Ionization losses of high energy heavy particle. J of Phys USSR, 32:920-923 (1957)
11. Paganetti H: Nuclear interactions in proton therapy: dose and relative biological effect distributions originating from primary and secondary particles. Phy Med Biol 47:747-764 (2002)
12. Carlson RF: Proton-nucleus total reaction cross sections and total cross sections up to 1 GeV. Atomic Data and Nuclear Data Tables 63:93-116 (1996)
13. Berger MJ: Penetration of proton beams through water. II. Three-dimensional absorbed dose distributions. National Institute of Standards and Technology Report NISTIR-5330 (1993)
14. Laitano RF, Rosetti M, Frisoni M: Effects of nuclear interactions on energy and stopping power in proton beam dosimetry. Nuc Inst Meth A376:466-476 (1996)
15. Berger MJ: ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer programs for calculating stopping-power and range tables for electrons, protons, and helium ions. National Institute of Standards and Technology Report NISTIR-1499 (1992)
16. Renberg PU, Measday DF, Pepian M, Savier B, Richard SC: Reaction cross sections for protons in the energy region 220-570 MeV. Nucl Phys A183:81 (1972)
17. Carlson RF, Cox AJ, Nimmo JR, et al: Proton total reaction cross sections for the doubly magic nuclei O-16, Ca-40, and Pb-208 in the energy range 20-50 MeV. Phys Rev C12:1167 (1975)

18. **Young PG, Arthur ED, Bozoian M, et al**: Transport data libraries for incident proton and neutron energies to 100 MeV. Los Alamos National Lab. Publication LA-11753-MS (1990)
19. **Seltzer SM**: An assessment of the role of charged secondaries from nonelastic nuclear interactions by therapy proton beams in water. National Institute of Standards and Technology, NISTIR-5221 (1993)
20. **Berger MJ**: Penetration of proton beams through water. I. Depth-dose distributions, spectra, and LET distributions. National Institute of Standards and Technology Report NSTIR-5226 (1993)
21. **RSICC CCC-715**: MCNPX user manual 2.4.0. Radiation Safety Information Computational Center, RSICC Computer Code Collection CCC-715, Oak Ridge National Library (2002)
22. **Goosens M, Giani S, Ravndal S**: GEANT: Detector description and simulation tool. CERN Technical Report W5013 (1999)
23. **Media J, Andro P**: PETRA - A Monte Carlo code for simulation of proton and electron in water. International Report MSF 1997-1, Karolinska Institutet, Stockholm Univ. (1997)
24. **Hong L, Goitein M, Bucciolini M, et al**: A pencil beam algorithm for proton dose calculations. Phys Med Biol 41: 1305-1330 (1996)
25. **Carlsson AK, Andro P, Brahme A**: Monte Carlo and analytical calculation of proton pencil beams for computerized treatment plan optimization. Phys Med Biol 42:1033-1053 (1997)
26. **Oelfke U, Bortfeld T**: Inverse planning for photon and proton beams. Medical Dosimetry 26:113-124 (2001)

Absorbed Dose Analysis in Water for Proton Beam using PTRAN Code System

Dong Hyeok Jeong, and Jin Young Kim*

Department of Radiation Oncology, Wonkwang University Hospital,
*Department of Physics, Kunsan National University

The absorbed dose for proton beam in water was calculated using the PTRAN code system. The proton interactions with water and the description on absorbed dose calculations are discussed, and the file structure and an execution example of the PTRAN codes are described. For 60, 100, 150, 200, and 250 MeV proton beams it is demonstrated that the absorbed dose is determined from the sum of Coulomb interactions and nuclear reactions, and that the Bragg peak feature depends on the energy straggling and multiple scattering. The PTRAN code was useful for studying the fundamental mechanism of the absorbed dose to water for clinical proton beams.

Key Words: Proton beam, Absorbed dose, PTRAN code