UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

INSTITUTO DE FÍSICA

BACHARELADO EM FÍSICA MÉDICA

JULIANA DE MOURA NASCIMENTO

Determinação de coeficientes mássicos de atenuação de materiais utilizando espectros de raios X polienergéticos

RIO DE JANEIRO

2022

JULIANA DE MOURA NASCIMENTO

Determinação de coeficientes mássicos de atenuação de materiais utilizando espectros de raios X polienergéticos

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador:

Prof. Drª. Josilene Cerqueira Santos

Rio de Janeiro

2022

JULIANA DE MOURA NASCIMENTO

Determinação de coeficientes mássicos de atenuação de materiais utilizando espectros de raios X polienergéticos

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Aprovado em:_____de__de_____.

BANCA EXAMINADORA:

_____
Dr. Ricardo Andrade Terini – IFUSP

_____
Dr. Daniel Alexandre Baptista Bonifácio – IPEN/CNEN

_____
Drª. Josilene Cerqueira Santos – IF/UFRJ (orientadora)

AGRADECIMENTOS

Agradeço toda a minha família, especialmente meu pai, minha mãe e meu irmão, por terem me dado suporte e incentivo e por terem me ensinado a ter foco e determinação para estudar.

Preciso fazer um agradecimento particular às minhas amigas Anna Célia e Sarah, que me ampararam, me motivaram e me aconselharam desde que entrei para o curso, em 2016.

Agradeço aos meus amigos Fabiane, Roberta, Pedro, Lucas e Felipe, que me acompanharam e me ajudaram durante toda a graduação. Um agradecimento especial à Fabiane, que sempre esteve comigo e que me apresentou a minha orientadora.

Agradeço à minha orientadora, Drª. Josilene Cerqueira Santos, pela paciência, pelos ensinamentos e, principalmente, pela atenção que me deu no último ano de graduação.

Agradeço também aos profissionais Odair Dias Gonçalves, João Emílio e Leonardo Pacífico que contribuíram para a a realização deste trabalho.

Agradeço ao meu colega Gabriel, que me ajudou com Python.

Agradeço à minha amiga Beatriz Assis por ter me auxiliado na coleta do espectros e pelos momentos de descontração.

Agradeço aos meus amigos do LCR, Beatriz, Felipe, Thalys e Isabelle que colaboraram de alguma forma com o trabalho.

RESUMO

A interação da radiação ionizante com a matéria depende do tipo de radiação, sua energia e de características do meio material que ela interage. A fração de fótons monoenergéticos incidentes que são atenuados por unidade de espessura de um dado material é uma constante chamada de coeficiente de atenuação linear do material. O estudo da interação da radiação ionizante com tecido e órgãos humanos em procedimentos diagnósticos ou terapêuticos requer a utilização de materiais com coeficientes de atenuação linear semelhantes aos dos tecidos biológicos, chamados de “materiais tecido-equivalente”. Daí a necessidade de se caracterizar esses materiais. O objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia experimental para obtenção do coeficiente mássico de atenuação de materiais para cada energia do feixe de raios X polienergético medidos por espectrometria de raios X. Essa metodologia é pouco discutida na literatura e propõe usar espectros polienergéticos para a determinação desses coeficientes em função da energia de cada fóton presente no feixe. O método consiste em medir espectros de raios X em geometria de feixe estreito, incidentes e transmitidos para diferentes espessuras de materiais. Para cada energia da distribuição, uma curva de atenuação é construída e o coeficiente de atenuação linear é determinado. As medições experimentais foram realizadas utilizando espectros de raios X gerados por tubos com anodo de W com tensões de 75,2 kVp e 75 kVp. Os espectros de raios X foram medidos com um sistema de espectroscopia com detector de CdTe. A análise foi feita apenas nos intervalos de energia onde os espectros possuem contagens significativas e menor incerteza estatística. Ao todo seis materiais foram analisados: alumínio, cobre, prata, polimetilmetacrilato, poliéster e resina dental. Os resultados apresentaram correlação direta entre os valores de coeficientes mássicos de atenuação experimentais e os valores de referência. Embora um pouco complexa, a metodologia proposta mostrou-se promissora para esse tipo de análise.

Palavras-chave: Coeficiente de Atenuação Linear; Coeficientes Mássicos de Atenuação; Raios X; Espectrometria; Feixes Polienergéticos.

ABSTRACT

Ionizing radiation interactions with matter depends on the type of radiation, its energy and characteristics of the material medium it interacts with. The fraction of incident monoenergetic photons that are attenuated per unit thickness of a given material is a constant called the linear attenuation coefficient of the material. The study of the interaction of ionizing radiation with human tissue and organs in diagnostic or therapeutic procedures requires the use of materials with linear attenuation coefficients similar to those of biological tissues, called “tissue-equivalent materials”. Hence the need to characterize these materials. The objective of this work is to develop an experimental methodology to obtain the mass attenuation coefficients of materials for each energy of the polyenergetic X-ray beam measured using an X-ray spectrometry system. This methodology is little discussed in the literature and proposes to use polyenergetic spectra to determine these coefficients as a function of the energy of each photon present in the beam. The method consists of measuring X-ray spectra in narrow beam geometry, incident and transmitted for different thicknesses of materials. For each energy in the spectra, an attenuattion curve is obtained and the linnear atenuation coefficiet is detrmined. The experimental measurements were performed using X-ray spectra generated by W anode tubes using voltages of 75.2 kVp and 75 kVp. X-ray spectra were measured with a CdTe detector spectroscopy system. The analysis was performed only in the energy ranges where the spectra have significant counts and lower statistical uncertainty. Altogether six materials were analyzed: aluminum, copper, silver, polymethylmethacrylate, polyester and dental resin. The results showed a direct correlation between the values of experimental attenuation mass coefficients and the reference values. Although complex, the proposed methodology has proved to be promissing to this kind of analisys.

Keywords: Linear Attenuation Coefficient; Mass Attenuation Coefficients; X ray; Spectrometry;Polyenergetic x-ray beams

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Esquema ilustrativo da produção de raios X de freamento. A imagem mostra o átomo do alvo carregado positivamente e três elétrons incidentes sobre o átomo: o primeiro (1) colide diretamente com o núcleo atômico e toda sua energia cinética é convertida em energia eletromagnética, o segundo (2) sofre uma interação próxima ao núcleo e apenas parte da sua energia é convertida em raios X e o terceiro (3) sofre uma interação mais distante do núcleo e uma parcela ainda menor da sua energia é convertida em energia eletromagnética, sendo o raio X menos energético dos três. 9
Figura 2 - A ilustração mostra que as transições eletrônicas correspondem às linhas de emissão de raios X. 10
Figura 3 - Imagem ilustrativa do efeito causado por diferentes valores de tensão (60, 80, 100 e 120 kV) no espectro. 12
Figura 4 - Imagem ilustrativa do efeito causado por diferentes valores de mAs (mAs aumentado em 1, 2 e 3 vezes) no espectro. 13
Figura 5 - Espectros de raios X de um tubo com alvo de W produzidos com tensão de 28 kV comparando a filtração de (0,460 ± 0,005) mmAl e (0,006 ± 0,005) mmMo.(CORRÊA; DE LUCENA; POTIENS; VIVOLO, 2009).....14
Figura 6 – Ilustração da geometria de feixe estreito. A figura está fora de escala. 20
Figura 7 - Folhas de diferentes espessuras de alumínio usadas para filtração adicional do feixe de raios X.....27
Figura 8 - Sistema de detecção usado no LABMETRO, à esquerda o detector de raios X e gama de CdTe modelo XR-100T da Amptek, à direita o espectrômetro da Amptek modelo PX5. 27
Figura 9 - Suporte usado para o detector e apoio regulável de altura.....28
Figura 10 - Sistema de colimação usado no LABMETRO para estreitar o feixe de raios X. 29
Figura 11 - Colimadores de 400 µm (à esquerda) e de 2000 µm (à direita) do LABMETRO. 29

Figura 12 - Montagem experimental no LABMETRO mostrando o detector de CdTe sobre o suporte, a fonte de raios X com colimação e o laser de alinhamento. 30
Figura 13 - Bloco de PMMA perpendicularmente ao feixe de raios X. 31
Figura 14 - Especificações do tubo de raios X industrial do LAFRAG.....31
Figura 15 - Detector e espectrômetro do LAFRAG. 32
Figura 16 - Montagem experimental para medição dos espectros de alumínio. 33
Figura 17 - Posicionamento dos materiais: (A) resina dental e (B) cunha escalonada de alumínio.....33
Figura 18 - Folha de cobre usada para espectrometria e suas especificações.....35
Figura 19 - Folhas de prata de 0,05 mm de espessura (esquerda) e de 0,10 mm de espessura (direita) usadas para mediação de espectros. 36
Figura 20: Cunha escalonada do LAFRAG. 36
Figura 21 - Blocos de poliéster formados pela aderência de filmes de transparência uma as outras (esquerda) e pacote com especificações do material.....37
Figura 22 - Placas de PMMA usados no LABMETRO. 38
Figura 23 - Blocos de resina dental usados no LAFRAG. 38
Figura 24 - Espectro polienergético de Tungstênio medido no LAFRAG com ajustes gaussianos para calibração em energia.....40
Figura 25 - Espectro discreto de Amerício-241 medido no LABMETRO com as indicações de energias dos picos observados. 41
Figura 26 - Reta de calibração usada para os espectros de alumínio.....42
Figura 27 - Espectros brutos (esquerda) e com corte em energia (direita) de Cobre.....44
Figura 28 - Esquema dos raios X antes de escape do detector de CdTe. 46
Figura 29 - Curva de atenuação do PMMA pelo método integrado.....47
Figura 30 - Exemplo de curva de atenuação do PMMA para energia 63,06 keV pelo programa em Python.....48
Figura 31 - Comparação de dois métodos de medição da taxa de pico de fluxo expiratório (PEFR) (a). Diferença contra a média para dados PEFR (b). 52
Figura 32 - Gráfico de FWHM pela energia em keV para avaliação da resolução do detector. 56

Figura 33 - Resolução em energia do detector de CdTe.....57
Figura 34 - Espectros medidos por seis diferentes espessuras e diferentes materiais. .59
Figura 35 - Espectro do feixe direto medido no LABMETRO antes e depois de passar pela correção de stripping. Espectro normalizado pelo máximo de contagens registradas. 60
Figura 36 - Curvas de atenuação dos seis materiais analisados pelo método integrado para espectros sem correção de stripping. 62
Figura 37 - Curvas de atenuação do alumínio pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python. 65
Figura 38 - Curvas de atenuação da prata pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python. 66
Figura 39 - Curvas de atenuação do cobre pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python. 67
Figura 40 - Curvas de atenuação do PMMA pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python. 68
Figura 41 - Curvas de atenuação do poliéster pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python. 69
Figura 42 - Curvas de atenuação da resina dental pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python 70
Figura 43 - Gráfico dos coeficientes mássicos de atenuação para a resina dental em função da energia. 71
Figura 44 - Espectro bruto (sem nenhuma correção) medido com a resina dental. 72
Figura 45 - Gráficos comparativos entre μ/ρ obtidos pelo método proposto e valores do NIST para todos os materiais analisados. 73
Figura 46 - Gráficos dos coeficientes de correlação r de Pearson para todos os materiais analisados. 75
Figura 47.- Comparação valores de μ/ρ medidos experimentalmente para a resina dental com valores de μ/ρ do tecido mamário, tecido adiposo e tecido glandular tabelados no NIST XCOM. 76

Figura 48 - Comparação valores de μ/ρ medidos experimentalmente para o PMMA com valores de μ/ρ do tecido mamário, tecido adiposo e tecido glandular tabelados no NIST XCOM. 77

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AAPM – Associação Americana de Físicos em Medicina – American Association of Physicists in Medicine

CSR – Camada Semirredutora

ICRU – Comissão Internacional de Unidades e Medidas de Radiação – International Commission on Radiation Units & Measurements

IR – Intensidade relativa

LABMETRO – Laboratório de Metrologia

LAFRAG – Laboratório de radiação gama e X

NIST – Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia – National Institute of Standards and Technology

PMMA – Polimetilmetacrilato

UERJ – Universidade do Estado do Rio de Janeiro

UFRJ – Universidade Federal do Rio de Janeiro

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO 5

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA 8

2.1 PRODUÇÃO DE RAIOS X 8

2.2 PARÂMETROS QUE AFETAM O ESPECTRO DE RAIOS X 11

2.3 ENERGIA MÉDIA E ENERGIA EFETIVA 14

2.4 EFEITOS DE DETECÇÃO 15

2.5 COEFICIENTE MÁSSICO DE ATENUAÇÃO 17

2.6 DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DOS COEFICIENTES MÁSSICOS DE ATENUAÇÃO DOS MATERIAIS 20

3. METODOLOGIA 24

3.1 MEDIÇÕES DE ESPECTROS 24

3.1.1 Setup experimental 25

3.1.2 Laboratório de Metrologia da UERJ 26

3.1.3 Laboratório de Radiação Gama e X da UFRJ 31

3.1.4 Materiais analisados 34

3.2 CALIBRAÇÃO EM ENERGIA 39

3.3 CORREÇÃO DOS ESPECTROS 42

3.3.1 Fator de normalização do mAs 43

3.3.2 Energias de corte 43

3.3.3 Correção de efeito de detecção no CdTe 45

3.3.4 Cálculo da energia média 46

3.4 CÁLCULO DO COEFICIENTE MÁSSICO DE ATENUAÇÃO USANDO ESPECTROS POLIENERGÉTICOS 47

3.5 PROGRAMA EM PYTHON 49

3.5.1 Linearização da curva de atenuação 49

3.5.2 Métricas estatística para análise da regressão linear 50

3.5.3 Gráficos 51

3.5.4 Testes estatísticos 51

3.6 ANÁLISE DAS INCERTEZAS 53

4. RESULTADOS 56

4.1 RESOLUÇÃO DO DETECTOR 56

4.2 ESPECTROS MEDIDOS 57

4.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS ESPECTROS CORRIGIDOS E ESPECTROS SEM CORREÇÃO 60

4.4 COEFICIENTES MÁSSICOS DE ATENUAÇÃO (MÉTODO INTEGRADO) 61

4.5 CURVAS DE ATENUAÇÃO (MÉTODO CANAL A CANAL) 64

4.6 INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE CONTAGENS DO ESPECTRO 71

4.7 GRÁFICOS COMPARATIVOS ENTRE μ/ρ EXPERIMENTAIS E VALORES DO NIST (MÉTODO CANAL A CANAL) 72

4.8 TESTE DO COEFICIENTE DE CORRELAÇÃO (r) DE PEARSON 74

4.9 COMPARAÇÃO ENTRE MATERIAL ESTUDADOS E TECIDOS BIOLÓGICOS 75

5. DISCUSSÃO E CONCLUSÕES 78

6. PROJEÇÕES FUTURAS E APLICAÇÕES 80

7. REFERÊNCIAS 81

APÊNDICES 86

1. INTRODUÇÃO

Os raios X são amplamente usados na medicina, tanto para diagnósticos como para terapias. Entretanto, a exposição à radiação ionizante deve ser realizada de forma prudente e as exposições médicas individuais à radiação devem ser justificadas (COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR, 2014) de modo que o benefício gerado pelo uso da radiação seja maior que os danos biológicos causados por sua aplicação. Em virtude disso, é preciso seguir os princípios de proteção radiológica e realizar o controle de qualidade dos equipamentos que empregam esse tipo de radiação.

De acordo com o Task Group 100 da AAPM (SAIFUL HUQ; FRAASS; DUNSCOMBE; GIBBONS JR *et al.*, 2016), o controle de qualidade engloba procedimentos para alcançar um nível desejável de qualidade. Tais procedimentos incluem a avaliação do estado de um parâmetro de tratamento, a comparação de tal parâmetro com o valor desejado e, quando houver diferença entre esses valores, a atuação para atingir a qualidade. Para isto, são necessários os chamados simuladores de tecido biológico, que servem como ferramenta para adoção dos protocolos e procedimentos que avaliam o desempenho dos aparelhos. Segundo a *International Commission on Radiation Units & Measurements* (ICRU) esses simuladores são objetos físicos utilizados para reproduzir as características de interação da radiação com o corpo ou parte do corpo humano (ICRU, 1989). Portanto, esses simuladores são confeccionados com materiais que possuem valores de coeficientes de atenuação linear da radiação próximos aos coeficientes dos tecidos que se deseja estudar. A determinação desses coeficientes é útil para caracterizar tais materiais, chamados de materiais tecido-equivalentes, e desenvolver novos simuladores mais aprimorados. Estes simuladores são especialmente importantes, pois estudos envolvendo fontes de radiação ionizante não podem ser realizados em humanos, visto que esta prática não obedece ao princípio da justificação, requisito básico de proteção radiológica. Portanto, os simuladores (do inglês *phantom*) são importantes principalmente para pesquisa, desenvolvimento e otimização de técnicas que fazem uso de radiação ionizante e para testes de controle de qualidade dos equipamentos.

Os coeficientes de atenuação linear são empregados também na área de dosimetria, para cálculo de dose em práticas diagnósticas e terapêuticas e em proteção radiológica, para cálculo de blindagens e sistemas de colimação.

Na literatura (AWASARMOL; GAIKWAD; RAUT; PAWAR, 2017; BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012; JAIYEN; PHUNPUEOK; THONGPOOL, 2019; MANJUNATHAA; SATHISHA; SEENAPPAA; GUPTAB *et al.*, 2019; OBAID; GAIKWAD; PAWAR, 2018; VILLANI; RODRIGUES JR; CAMPOS, 2020), encontramos diversos trabalhos que utilizam espectrometria de feixes polienergéticos ou de fontes de raios gama para a determinação dos coeficientes de atenuação linear (μ). Ao usar fontes de raios gamas, os coeficientes são obtidos somente para as energias discretas específicas emitidas por tais fontes. No método que utiliza espectros polienergéticos, que chamaremos de **método integrado**, da relação aproximadamente exponencial entre as contagens totais medidas no espectro incidente e nos espectros transmitidos por diferentes espessuras de materiais obtém-se apenas um valor de μ, referente à energia média do espectro. Isso pode ser considerado uma limitação desta metodologia, já que o coeficiente de atenuação linear é função da energia. Sendo assim, os coeficientes de atenuação não podem ser obtidos pelos métodos citados para todas as energias de fótons que compõem feixes de raios X tipicamente utilizados em aplicações clínicas do radiodiagnóstico.

Existe ainda a possibilidade de se calcular esses coeficientes para todas as energias de um espectro polienergético (FRIMAIO; NASCIMENTO; BARRIO; CAMPOS *et al.*, 2019; SANTOS, J. C.; ALMEIDA, C. D.; IWAHARA, A.; PEIXOTO, J. E., 2019). Neste trabalho, chamarei este método de **“canal a canal”.** Esse método deve ser mais bem estudado, uma vez que é pouco discutido na literatura e, além disso, permite a determinação do coeficiente de atenuação para cada canal que compõe um espectro. Outra vantagem deste método, está na melhor caracterização dos materiais tecido-equivalentes e, consequentemente, na otimização dos simuladores de corpo humano. O método canal a canal possui algumas limitações como a complexidade em alinhar e calibrar os instrumentos para medição dos espectros; a resolução do detector, já que

alguns detectores não distinguem tão bem fótons de diferentes energias, entretanto, consideramos que cada canal possui apenas uma única energia; e a influência dos efeitos de detecção nos espectros (DO NASCIMENTO; SANTOS; MACEDO ; PACÍFICO *et al.*, 2021). Além disso, existe uma complexidade e um grande volume de cálculos necessários para obtenção do μ para cada energia do feixe.

Portanto, o objetivo deste trabalho é validar experimentalmente o método canal a canal e determinar os coeficientes mássicos de atenuação (μ/ρ) de materiais utilizando espectros de raios X polienergéticos.

Além disso, o trabalho visa implementar uma ferramenta de uso prático, programada em Python, que será desenvolvida para o cálculo automático dos coeficientes utilizando dados experimentais (espectros medidos, espessuras e densidades dos materiais a serem analisados) permitindo a determinação de μ/ρ de outros materiais por outros usuários. Este programa poderá auxiliar no volume de cálculos exigidos pelo método canal a canal.

O estudo busca também avaliar as principais metodologias experimentais empregadas para determinação de coeficientes de atenuação linear de materiais, utilizando espectrometria de raios X em feixes monoenergéticos e feixes polienergéticos, pelo método integrado ou pelo método canal a canal (SANTOS, J. C.; ALMEIDA, C. D.; IWAHARA, A.; PEIXOTO, J. E., 2019). Esta avaliação será baseada na comparação dos resultados experimentais com valores de referência de coeficiente de atenuação para materiais do banco dados do *National Institute of Standards and Technology*, NIST XCOM (BERGER; HUBBELL; SELTZER; CHANG *et al.*, 2010).

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 PRODUÇÃO DE RAIOS X

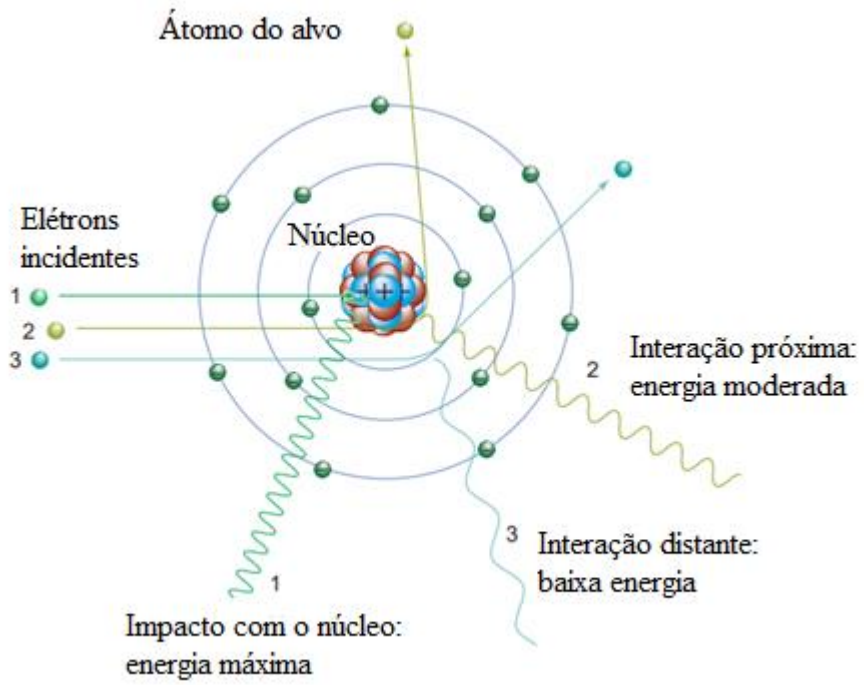
Os raios X podem ser produzidos a partir de dois processos físicos: sendo um deles a partir do freamento de elétrons acelerados em direção ao núcleo de átomos de um alvo, chamados de raios X de *Bremsstrahlung,* e o outro a partir da ionização do átomo, chamados de raios X característicos.

Os raios X de *Bremsstrahlung* são produzidos quando um elétron acelerado é atraído para as proximidades do campo elétrico criado pelo núcleo atômico do alvo, carregado positivamente, sofrendo uma desaceleração ou freamento. Ao colidir com o alvo, a energia cinética do elétron é convertida em outras formas de energia, principalmente em calor. Uma parcela dos elétrons interage com as forças coulombianas do núcleo atômico. Essas forças desaceleram e mudam a direção dos elétrons, dessa forma, a energia cinética dos elétrons é convertida em energia eletromagnética, que é emitida através de fótons de raios X (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). Esse tipo de radiação dá origem a um espectro contínuo de fótons com uma distribuição de energia que vai desde zero até a energia cinética máxima dos elétrons, pois a perda de energia do elétron ao interagir com o núcleo atômico depende da distância entre eles e da energia cinética do elétron, conforme visto na Figura 1. Como a força coulombiana é inversamente proporcional à distância, as forças são mais fortes em distâncias menores, onde a desaceleração é maior e o elétron converte mais energia em radiação.

Os raios X característicos são produzidos após a ionização do átomo. Quando uma partícula ou fóton possui energia maior que a energia de ligação dos elétrons, é possível ejetar um elétron das camadas eletrônicas mais internas, por exemplo a camada K, e o átomo fica ionizado. O átomo então precisa preencher o buraco com um elétron de outra camada mais externa e, neste processo, um elétron de uma camada mais externa, por exemplo camada L ou M, ocupa essa vacância e um quantum de radiação é emitido (AGARWAL, 1991). Quando a diferença de energias entre as camadas

eletrônicas é da ordem de muitos keV (OKUNO; YOSHIMURA, 2010), ocorre a emissão de um fóton de raios X com energia igual a diferença de energia entre os níveis eletrônicos envolvidos.

Figura 1 - Esquema ilustrativo da produção de raios X de freamento. A imagem mostra o átomo do alvo carregado positivamente e três elétrons incidentes sobre o átomo: o primeiro (1) colide diretamente com o núcleo atômico e toda sua energia cinética é convertida em energia eletromagnética, o segundo (2) sofre uma interação próxima ao núcleo e apenas parte da sua energia é convertida em raios X e o terceiro (3) sofre uma interação mais distante do núcleo e uma parcela ainda menor da sua energia é convertida em energia eletromagnética, sendo o raio X menos energético dos três.

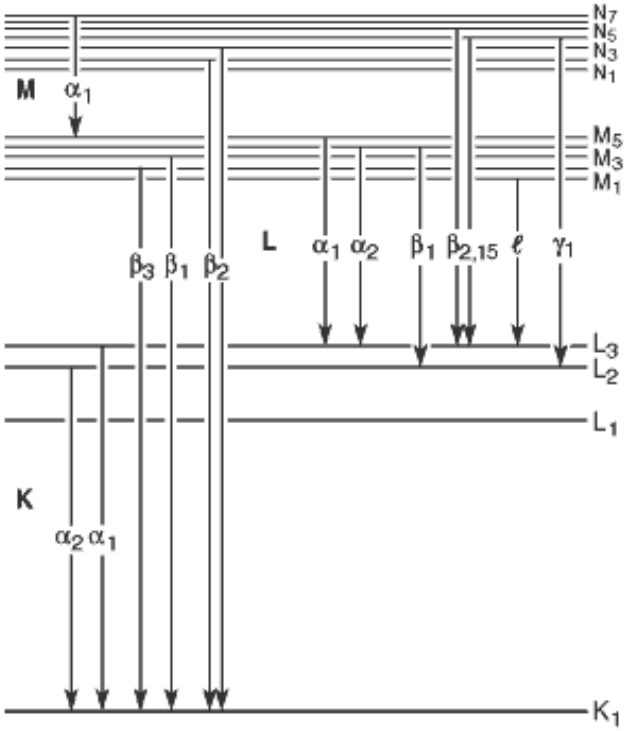


Fonte: Figura adaptada de BUSHBERG, Jerrold T.; BOONE, John M. The essential physics of medical imaging. Lippincott Williams & Wilkins, 2011.

Este tipo de radiação tem valores bem definidos de energia, resultando assim em um espectro discreto de energias e, como cada elemento possui valores únicos de energia de ligação, cada elemento terá um espectro próprio, ou linhas características. A Figura 2 mostra como os raios X característicos são nomeados de acordo com as transições de seus estados de energia. Utiliza-se a letra que representa a camada que

foi preenchida seguido do subscrito α, para transições de elétrons entre camadas adjacentes, consequentemente, menos energéticos, ou β, para transições de elétrons entre camadas não adjacentes, mais energéticos (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). Por exemplo, a linha $K_{\alpha 1}$ do W, é produzida por fótons originados da transição de elétrons da camada L para a K, com energia dada pela diferença entre as energias de ligação das duas camadas, 59,3 keV. A linha $K_{\beta 1}$ do W, é produzida por fótons originados da transição de elétrons da camada M para a K, com energia dada pela diferença entre as energias de ligação das duas camadas, 67,2 keV (KIRZ; ATTWOOD; HENKE; HOWELLS *et al.*, 2009).

Figura 2 - A ilustração mostra que as transições eletrônicas correspondem às linhas de emissão de raios X.



Fonte: KIRZ; ATTWOOD; HENKE; HOWELLS et al., 2009.

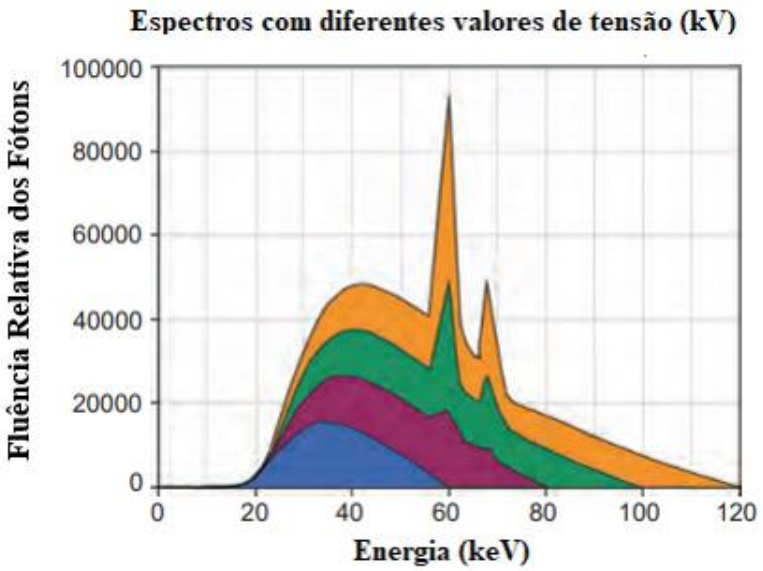
2.2 PARÂMETROS QUE AFETAM O ESPECTRO DE RAIOS X

Existem alguns parâmetros que afetam os espectros de raios X produzidos utilizando um tubo de raios X. Dentre eles podemos citar os principais: a tensão aplicada ao tubo de raios X, a corrente e tempo de exposição (ou o efeito do conjunto dado pelo produto corrente-tempo), o filtro usado na saída do tubo, a forma de onda do gerador e o material do alvo ou anodo. Dentre estes, serão discutidos apenas os três primeiros parâmetros, que são parâmetros que podem ser facilmente variados em um tubo de raios X gerando feixes de diferentes intensidades e energias médias, o que afeta diretamente o trabalho proposto.

Para acelerar os elétrons do cátodo, gerados em um processo termiônico, em direção ao alvo (ânodo), é necessário submetê-los a uma diferença de potencial ou tensão de pico. Sendo assim, quanto maior a tensão maior a energia dos elétrons que, ao ser desacelerado, poderá ser emitida como fótons de raios X de freamento. Portanto, maior a eficiência na produção de raios X. Além disso, dependendo do valor da energia de ligação do elemento do ânodo, mais picos característicos podem aparecer. Por exemplo, para produzir raios X da camada K do tungstênio (W) é necessária uma tensão mínima de 69,52 kVp, para acelerar elétrons com energia de 69,52 keV, que é a energia de ligação de elétrons da camada K do W (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). Espectros de W produzidos com tensões inferiores a essa não vão apresentar este pico característico, apenas raios X de freamento. A tensão também implica no intervalo de energias do espectro, ou seja, a energia máxima do espectro será numericamente igual a tensão prescrita no equipamento. De forma geral, a voltagem afeta tanto a quantidade (relacionada a quantidade de fótons que compõem o feixe) quanto a qualidade (relacionada a energia média do feixe e, portanto, sua penetrabilidade) de um feixe de raios X, que por sua vez, irá alterar as contagens e as energias de fótons do espectro medido (Figura 3).

Os espectros apresentados na Figura 3 mostram o efeito da tensão na distribuição energética de fótons produzidos.

Figura 3 - Imagem ilustrativa do efeito causado por diferentes valores de tensão (60, 80, 100 e 120 kV) no espectro.



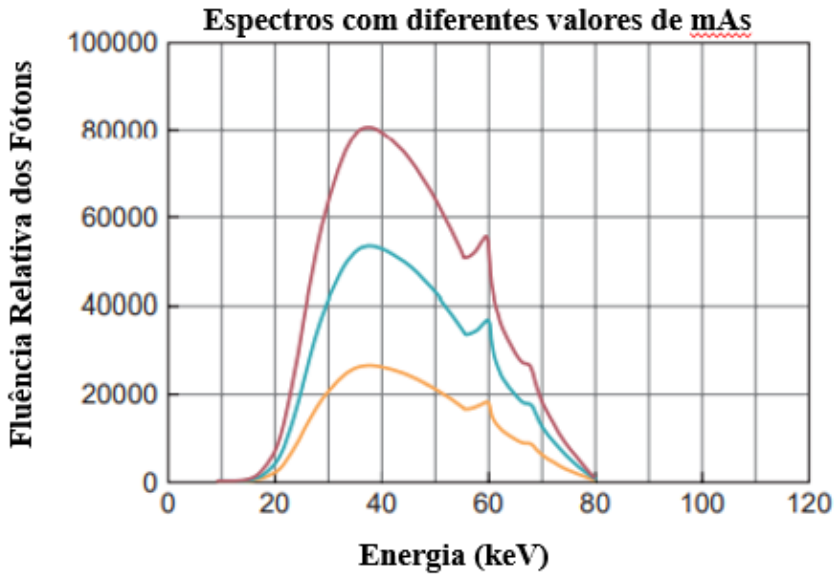
Fonte: Figura adaptada de BUSHBERG, Jerrold T.; BOONE, John M. The essential physics of medical imaging. Lippincott Williams & Wilkins, 2011.

Os dois picos mostrados na imagem ilustram como os raios X característicos são visualizados nos espectros. Na imagem também é possível visualizar o espectro de raios X de *Bremsstrahlung*, que são contagens em outras energias, a depender da interação do elétron com o núcleo.

A corrente é definida como quantidade de carga em movimento através de uma área por unidade de tempo (YOUNG; FREEDMAN, 2009). Em um tubo de raios X, essa corrente determina o fluxo de elétrons que são acelerados em direção ao anodo e é da ordem de miliamperes (mA) (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). Ao aumentar a corrente, o número de elétrons acelerados também aumenta. Quanto mais elétrons acelerados, maior a taxa de produção de raios X. Portanto, aumentar a corrente do equipamento significa aumentar as taxas de contagens de eventos no processo de medição do espectro. A corrente combinada com o tempo de exposição (mAs) define a quantidade total de elétrons que foi acelerada em direção ao

alvo no processo de produção de raios X e apresenta relação de proporcionalidade com o total de fótons de raios X que é produzido em um feixe. A Figura 4 mostra que, diferentemente da tensão, a corrente afeta somente a quantidade de fótons no feixe e não altera a energia média do feixe ou sua penetrabilidade.

Figura 4 - Imagem ilustrativa do efeito causado por diferentes valores de mAs (mAs aumentado em 1, 2 e 3 vezes) no espectro.

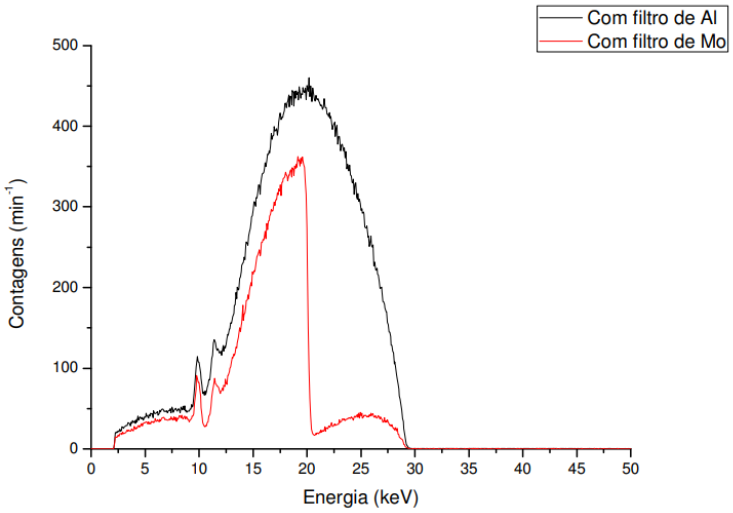


Fonte: Figura adaptada de BUSHBERG, Jerrold T.; BOONE, John M. The essential physics of medical imaging. Lippincott Williams & Wilkins, 2011.

Os filtros, como o próprio nome diz, permite a filtração de raios X do feixe que atravessa a saída do tubo. Os filtros podem ser de diversos materiais e sua utilização depende do objetivo ou necessidade de se modificar a forma do espectro para um determinado intervalo de energia. Por exemplo, filtros de alumínio são usados em radiodiagnóstico para atenuar os raios X de baixas energias, que são fracamente penetrantes e não são úteis para a formação da imagem. No espectro, dependendo da

espessura e do elemento usado, os filtros removem fótons de determinada energia do espectro (absorvendo fótons do feixe) de acordo com o objetivo do exame. Os filtros de Molibdênio (Mo), por exemplo, comumente usados em mamógrafos, são caracterizados por atenuar energias a partir da energia da borda K de absorção do Mo (20 keV) (Figura 5).

Figura 5 - Espectros de raios X de um tubo com alvo de W produzidos com tensão de 28 kV comparando a filtração de (0,460 ± 0,005) mmAl e (0,006 ± 0,005) mmMo.(CORRÊA; DE LUCENA; POTIENS; VIVOLO, 2009)



Fonte: CORRÊA, 2009.

2.3 ENERGIA MÉDIA E ENERGIA EFETIVA

A energia média de um espectro de raios X (distribuição discreta) é definida como o somatório do produto das contagens pela energia do canal para todos os canais divido pela área total. A Equação 1 define a energia média (E_m) através de uma expressão matemática:

$$E_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_i \cdot N(E_i)}{\sum_{i}^{n} N(E_i)} \quad (1)$$

onde E_i *i-ésima* energia do feixe e $N(E)_i$ é o número de fótons de energia E_i contabilizados em um espectro medido com *n* canais ou *n* diferentes valores de energia.

Em alguns casos, a distribuição de energias em um espectro pode ser representada por um valor único de energia, a energia efetiva, E_{ef} (ALBUQUERQUE; CALDAS, 1990). A E_{ef} se aplica a feixes polienergéticos e consiste na energia necessária para produzir o mesmo valor de camada semirredutora (CSR) de um feixe monoenergético (PODGORSAK, 2005). A energia efetiva é comumente usada para caracterizar a penetração de um feixe de raios X polienergético. A CSR é definida como a espessura de material necessária para diminuir a exposição do feixe pela metade, na geometria de feixe estreito ou, do inglês, geometria *narrow beam* (ATTIX, 1986). Dessa forma, a energia efetiva, o coeficiente mássico de atenuação e a camada semirredutora se relacionam pela Equação 2 (SANTOS, 2017):

$$\left(\frac{\mu(E_{ef})}{\rho}\right)_m = \frac{\ln(2)}{\rho_m \cdot CSR_m} \quad (2)$$

onde $\left(\frac{\mu(E_{ef})}{\rho}\right)_m$ é o coeficiente mássico de atenuação de um material *m*, ρ_m é a densidade do material e CSR_m é a camada semirredutora.

2.4 EFEITOS DE DETECÇÃO

Alguns detectores apresentam algumas limitações operacionais que podem afetar as análises por espectrometria (DO NASCIMENTO; SANTOS; MACEDO ; PACÍFICO *et al.*, 2021). Isso acontece devido algumas interações do próprio elemento sensível do

detector com a radiação e também devido a eficiência intrínseca de detecção, que depende do material do detector, da energia da radiação incidente e da espessura física do elemento sensível na direção da radiação incidente.

Em uma situação ideal, o espectro medido de uma fonte monoenergética deveria apresentar contagens apenas no canal correspondente a energia específica da fonte usada. Em qualquer medição de distribuição de altura de pulso, é necessário saber a resolução e o número total de contagens detectadas. Quanto maior o número de contagens maior pode ser o número de canais. E, nessa situação ideal, poderíamos considerar apenas uma energia por canal (KNOLL, 2000). Quanto melhor a resolução do sistema de detecção menor a largura do pico. Entretanto, os detectores não possuem essa resolução ideal. Outros efeitos, tais como interação Compton no detector e escape de raios X característicos, somados à limitação da resolução do detector podem “deformar” o espectro medido gerando contagens espúrias em energias onde não são esperadas.

O escape de raios X característicos é resultante da interação fotoelétrica da radiação incidente com um elétron do elemento detector, dando origem a uma desexcitação atômica que poderá emitir um fóton capaz de escapar do volume sensível. Um pico de escape aparecerá no espectro, produzindo um sinal no detector cuja energia é dada pela subtração da energia do fóton incidente ($Einc$) pela energia raio X característico que escapou ($Ekedge$) (DO NASCIMENTO; SANTOS; MACEDO ; PACÍFICO *et al.*, 2021; KNOLL, 2000).

Outra possível causa dessas contagens é devido ao espalhamento Compton, ou seja, fótons incidentes no elemento detector que foram espalhados e escaparam do detector. Consequentemente, uma energia menor que a energia incidente é contabilizada, gerando contagens em canais com energias menores do que a energia da fonte monoenergética no processo de medição. Detectores que possuem seu elemento detector com baixas espessuras podem sofrer esse efeito, tendo em vista que o livre caminho médio dos fótons espalhados pode ser superior a essas dimensões.

Em princípio, todos os detectores dão origem a um pulso de saída para cada fóton de radiação que interage dentro de seu volume sensível (KNOLL, 2000). Partículas carregadas primárias interagem diretamente com o detector após sua entrada no volume de detecção. Partículas não carregadas são detectadas indiretamente e, por isso, sua detecção pode não ser 100% eficiente. No caso da detecção de fótons, é necessário ter um valor que relacione o número de pulsos detectados com o número fótons incidentes no detector. A eficiência de detecção pode ser dividida em eficiência absoluta e eficiência intrínseca (KNOLL, 2000). A eficiência absoluta é dada pela razão entre o número de pulsos registrados pelo detector e o número de fótons emitidos pela fonte, ela depende de propriedades do próprio detector e da geometria experimental empregada. A eficiência intrínseca é dada pela razão entre o número de pulsos registrados pelo detector e o número de fótons incidentes no detector, esta é influenciada pelo material detector, pela energia dos fótons e pela espessura física do detector na direção da radiação incidente (KNOLL, 2000). Os detectores, na realidade, fazem uma seleção dos pulsos detectados que serão contados como evento através de um limiar de altura de pulso. Esse limiar serve para descartar possíveis contagens provenientes de fontes de ruído. Sendo assim, além dos fatores mencionados, a eficiência das contagens também está relacionada ao evento que é registrado pelo detector.

2.5 COEFICIENTE MÁSSICO DE ATENUAÇÃO

Quando a radiação atravessa um meio material, de forma perpendicular ao plano do material, ela pode interagir com o meio por diversos processos físicos. Considerando que o feixe de radiação seja composto por partículas não carregadas e desconsiderando a produção de radiação secundária, as partículas que compõem o feixe irão atravessar direto o material sem nenhuma interação ou serão absorvidas por interação, resultando a atenuação da radiação.

A intensidade do feixe de radiação, ao atravessar o material, obedece a lei de Lambert-Beer (JACKSON; HAWKES, 1980) ou lei da atenuação exponencial (ATTIX, 1986). Para uma dada energia de fótons, *E*, a lei de Lambert-Beer pode ser expressa pela seguinte equação:

$$I = I_o e^{-\mu(E)x} \tag{3}$$

$$\mu(E) = \frac{1}{x} ln\left(\frac{I_0}{I}\right) \tag{4}$$

onde, I é a intensidade dos fótons que não interagiram após passar pelo material de espessura x com coeficiente de atenuação linear μ, com intensidade inicial I_o. Esta equação pode ser usada para feixes monoenergéticos, em que todos os fótons possuem a mesma energia, já que a atenuação resulta apenas do número de fótons e não da energia deles.

O μ é chamado de coeficiente de atenuação linear e quantifica a fração de fótons que atravessaram e interagiram por unidade de espessura do material atenuador (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). O coeficiente de atenuação linear tem dimensão de inverso de comprimento, ou, mais comumente, inverso de centímetro (cm^{-1}).

Como cada material possui uma densidade ρ_m, sendo assim, os fótons incidentes possuem uma probabilidade de interação que irá depender do número de átomos por área de espessura do material atenuador, ou seja, o μ é dependente de ρ_m. Para contornar isso, existe também o chamado coeficiente mássico de atenuação μ_m, que normaliza o coeficiente de atenuação para a densidade do material. O μ_m é geralmente expresso em cm^2/g e é independente da densidade do material atenuador (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012).

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho_m} \tag{5}$$

onde μ_m é o coeficiente mássico de atenuação, μ é o coeficiente de atenuação linear do material, em cm^{-1}, e ρ_m é a densidade do material, em $\mathrm{g/cm}^3$.

O coeficiente mássico de atenuação também pode ser escrito através dos processos de interação que ocorrem entre os fótons de raios X ou raios gama e a matéria, como na Equação 6.

$$\frac{\pi}{\rho} = \frac{\tau}{\rho} + \frac{\sigma}{\rho} + \frac{\kappa}{\rho} + \frac{\sigma_R}{\rho} \tag{6}$$

onde em que τ/ρ é a contribuição do efeito fotoelétrico, σ/ρ a contribuição do efeito Compton, κ/ρ é a contribuição da produção de pares e σ_R/ρ a contribuição do espalhamento Rayleigh.

Tais contribuições dependem dos valores de seção de choque de cada processo. A seção de choque corresponde a área efetiva que o fóton deve incidir para interagir com o alvo. Outra interpretação para a seção de choque é simplesmente a probabilidade de interação do fóton com a matéria.

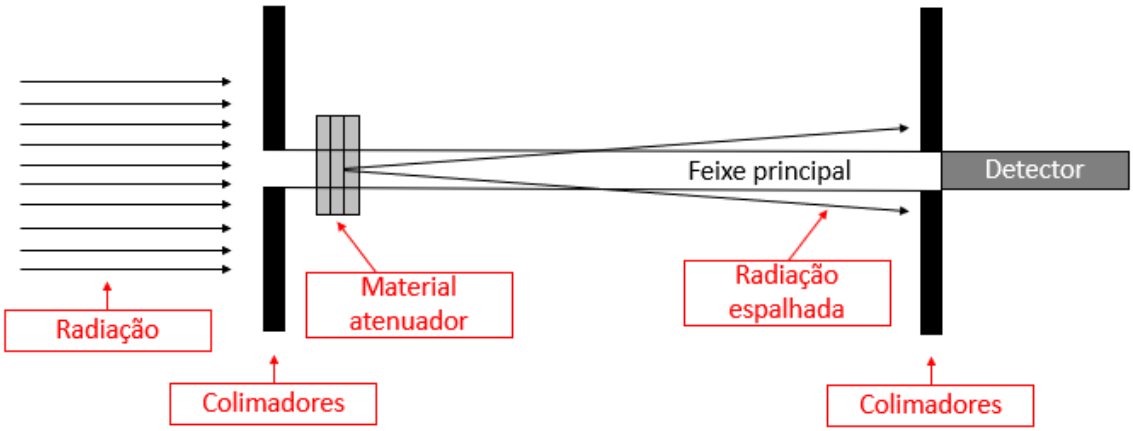
A Equação 4 considera uma situação ideal onde não há radiação secundária ou espalhada, mas na prática não é possível controlar a produção destas como resultado das interações. Neste caso, ideal é usar uma geometria de feixe mais colimado. A geometria de feixe estreito ou *narrow-beam* é mais comumente usada, pois previne que a radiação secundária ou espalhada atinja o detector (ATTIX, 1986). Para isso, é necessário que:

- O detector esteja a uma distância considerável das amostras de material atenuador, de forma que partículas espalhadas sofram desvio e não atinjam o detector;
- O feixe seja colimado de forma a cobrir a área sensível do detector;

- A fonte de radiação esteja a uma distância em que a radiação incidente esteja quase que perpendicularmente ao plano das amostras de material atenuador e que a radiação secundária e espalhada diminua com a lei do quadrado do inverso da distância.

A Figura 6 ilustra a geometria de feixe estreito levando em conta os itens destacados.

Figura 6 – Ilustração da geometria de feixe estreito. A figura está fora de escala.



2.6 DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DOS COEFICIENTES MÁSSICOS DE ATENUAÇÃO DOS MATERIAIS

Um dos métodos para obter os coeficientes de atenuação linear de materiais envolve medições de espectros de raios X incidentes e transmitidos pelos materiais. Um espectro de raios X consiste na distribuição energética de um feixe de fótons que é medido como um histograma de canais por contagens de eventos detectados em sistema de espectrometria de raios X que utiliza detector semicondutor de materiais tais como

Ge, Si, CdTe, entre outros. No eixo x do histograma, o número de canais é proporcional à energia dos fótons de raios X e, no eixo y, às contagens de fótons detectadas em cada canal.

Para determinar experimentalmente os coeficientes de atenuação lineares dos materiais usamos fontes monoenergéticas, fontes de raios gama (também monoenergéticas) ou fontes polienergéticas. Conforme mencionado na Introdução, as fontes de raios gama possuem apenas energias específicas de emissões e o valor de μ(E) é obtido pela Equação 4 para a energia de emissão da fonte.

Para feixes polienergéticos, como fontes de raios X, o método mais comumente usado para o cálculo de μ/ρ, é o método que chamamos de método integrado. No método integrado, como o nome diz, as contagens totais dos espectros são contabilizadas, portanto, é realizado o somatório das contagens dos fótons incidentes sem nenhum material atenuador e outro somatório das contagens dos fótons transmitidos por uma espessura x. Este método usa a energia média do espectro do feixe direto para o cálculo do coeficiente de atenuação linear, conforme a Equação 7.

$$\mu(E_{média}) = \frac{1}{x} ln\left(\frac{\sum_{i=1}^{n} I_0}{\sum_{i=1}^{n} I_x}\right) \tag{7}$$

onde $\mu(E_{média})$ é o coeficiente de atenuação determinado para a energia média do espectro, $\sum_{i=1}^{n} I_0$ é o somatório das contagens de fótons do feixe incidente, I_0, em todos os canais, e $\sum_{i=1}^{n} I_x$ é o somatório das contagens de fótons do feixe transmitido, I_x, através de uma espessura x de material.

Um outro método mais adequado, pois determina o μ para todas as energias do feixe polienergético, é o método que chamamos de método canal a canal. Para cada canal, a Equação 7 passa a ser:

$$\mu(E_i) = \frac{1}{x} ln\left(\frac{I_0(E_i)}{I\,(E_i)}\right) \tag{8}$$

onde $I_0(E_i)$ é a intensidade de fótons incidentes com energia E_i, e $I\,(E_i)$ é a intensidade de fótons transmitidos através de uma espessura x de material com energia E_i.

Essa forma de calcular o μ (Equação 8) é pouco explorada e quase não foram encontrados estudos na literatura sobre a aplicação desta metodologia (FRIMAIO; NASCIMENTO; BARRIO; CAMPOS *et al.*, 2019; SANTOS, J. C.; ALMEIDA, C. D.; IWAHARA, A.; PEIXOTO, J. E., 2019; SANTOS, JOSILENE C.; ALMEIDA, CLÁUDIO D.; IWAHARA, AKIRA.; PEIXOTO, JOÃO E., 2019; SIRICO; FRIMAIO; COSTA, 2020). A vantagem desta metodologia é fornecer os coeficientes μ/ρ em um intervalo maior de energia. Já, a desvantagem, como mencionado na seção 1, está na complexidade do experimento, em termos de alinhamento, geometria adequada, tempo de aquisição; nas distorções dos espectros (efeitos de detecção); e na resolução do detector.

Existem outras metodologias para obtenção dos coeficientes de atenuação linear, por exemplo através de imagens radiográficas (MOUSA; KUSMINART ; SUPARTA, 2017), que utiliza as intensidades de escala de cinza nas imagens, convertidas de diferentes valores de pixel, para diferentes espessuras atenuadoras e aplica a lei de Lambert-Beer nos cálculos. Outra opção seria obter valores destes coeficientes por meio da composição química do material estudado (PEREIRA; CARDOSO; DA ROSA; DE SOUZA *et al.*, 2021). Para isso, é preciso fornecer dados de composição química do material, com as frações por peso de cada constituinte, ao banco de dados do Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia (NIST XCOM), que irá fornecer os valores de μ. Os coeficientes de atenuação total para compostos ou misturas são obtidos como somas das quantidades correspondentes para os seus constituintes atômicos. No entanto, essa forma de obtenção do μ/ρ possui algumas limitações, uma vez que desconsidera efeitos devido a estrutura molecular e efeito fotonuclear e também o estado físico do composto

ou mistura, que modificam as seções de choque e podem contribuir no valor de coeficiente de atenuação total (BERGER; HUBBELL; SELTZER; CHANG *et al.*, 2010)

3. METODOLOGIA

De acordo com a Equação 4, são necessários espectros de raios X incidentes e transmitidos por um dado material para obter o valor do coeficiente de atenuação linear do mesmo. Portanto, neste trabalho foram medidos os espectros de raios X incidentes e transmitidos por seis diferentes materiais. Os espectros medidos foram transmitidos por espessuras crescentes para avaliar a atenuação em função da espessura. A curva de atenuação é um gráfico monolog de fração de transmissão por espessura de material atenuador. Neste trabalho, as curvas de atenuação são formadas por seis pontos, uma vez que foram usadas seis diferentes espessuras, incluindo a espessura zero, para a medição do feixe direto. Os coeficientes de atenuação linear (μ) foram então adquiridos pelo ajuste linear da curva de atenuação para cada energia do espectro, testando a metodologia proposta.

Como os espectros possuem muitas energias, a execução dos cálculos de coeficientes mássicos de atenuação (μ/ρ) pela metodologia canal a canal é bastante complexa e exaustiva, por isso, desenvolvemos um código em Python para realização desses cálculos. Os coeficientes mássicos de atenuação, μ/ρ, foram obtidos pela razão entre o μ e a densidade do material estudado, ρ. O detalhamento dos procedimentos experimentais é apresentado nas subseções a seguir.

3.1 MEDIÇÕES DE ESPECTROS

Os espectros foram medidos no Laboratório de Metrologia (LABMETRO), que pertence ao Instituto de Biologia Roberto Alcantara Gomes da Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) e no Laboratório de Radiação Gama e X (LAFRAG), que pertence ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ).

Para determinar os coeficientes mássicos de atenuação dos materiais utilizando espectros de raios X polienergéticos, seis espectros diferentes foram necessários, sendo um espectro do feixe direto, sem nenhum material atenuador, e mais cinco espectros do feixe transmitido, em cinco espessuras diferentes de material atenuador. Esses espectros foram necessários para plotar a curva de atenuação. Utilizamos a geometria experimental mais indicada, a geometria de feixe estreito e colimado, discutida na subseção 2.5.

Ao todo seis materiais foram estudados: alumínio, cobre, prata, polimetilmetacrilato (PMMA), poliéster e uma resina dental. Para cada material analisado, as espessuras foram organizadas de forma crescente, ou seja, a cada nova medida de espectro, uma nova folha ou bloco do mesmo material atenuador era agrupado ao anterior, até totalizar 6 espessuras diferentes, contando com a espessura zero (feixe direto).

As medições dos espectros foram realizadas seguindo critérios de tempo de aquisição e contagens mínimas em um determinado canal.

3.1.1 Setup experimental

As metodologias e montagens experimentais foram divididas em dois laboratórios: o LABMETRO e o LAFRAG. Além dos laboratórios, algumas medidas foram realizadas em datas e com técnicas diferentes.

Os valores de tensão foram ajustados entre 70,2 keV e 75,2 keV, conforme indicado na Tabela 1. A corrente foi ajustada de forma a satisfazer um o tempo morto do detector menor do que 5%, durante a exposição do feixe direto. A Tabela 1 lista todos os materiais testados com os parâmetros de aquisição dos espectros.

Em todas as medições dos espectros, a corrente se mantinha em um valor fixo, entretanto, o tempo de aquisição era aumentado à medida que a espessura era aumentada. Essa metodologia de medição foi usada porque quanto maior a espessura atenuadora menor as contagens totais, que não era o desejado, uma vez que baixas

contagens deixam o espectro ruidoso e causam maior imprecisão no valor de μ. Para compensar esta variação do tempo de aquisição entre as medidas, utilizamos um fator de correção do mAs, que será mais discutido na subseção 3.3, antes de fazer os cálculos de μ / ρ.

Tabela 1 - Parâmetros de aquisição dos espectros utilizados para analisar os materiais

Material	**Tensão (kVp)**	**Corrente (mA)**	**Distância Tubo-Detector (m)**	**Tamanho do Colimador (μm)**
Alumínio	75,2	8,5	0,70	200
Cobre	75,0	0,7	2,00	400
Prata	75,0	0,7	2,00	400
PMMA	75,0	0,5	2,36	400
Poliéster	75,0	0,5	2,36	400
Resina Dental	70,2	0,3	0,70	200

3.1.2 Laboratório de Metrologia da UERJ

No LABMETRO, foi utilizado um tubo de raios X industrial Comet, com alvo de Tungstênio (W), modelo MXR-160/22. O feixe foi filtrado com folhas de alumínio para remover todas as linhas L características do Tungstênio dos espectros, cuja linha mais energética do conjunto é a Lg de 11,28 keV(KIRZ; ATTWOOD; HENKE; HOWELLS *et al.*, 2009). A Figura 7 mostra folhas de alumínio de 0,518 mm, de 0,100 mm, de 0,106 mm e de 0,107 mm de espessura, usadas como filtração adicional nas medições.

O processador digital de pulsos PX5 utiliza como dados de entrada os sinais de saída do pré-amplificador. O PX5 digitaliza esses sinais, aplica processamento digital em tempo real ao sinal, detecta a amplitude do pico (digitalmente) e armazena esse valor em sua memória de histograma, gerando um espectro de energia. O espectro é então transmitido pela interface USB, Ethernet ou RS-232 do PX5 para o computador do usuário (AMPTEK.).

Figura 7 - Folhas de diferentes espessuras de alumínio usadas para filtração adicional do feixe de raios X.

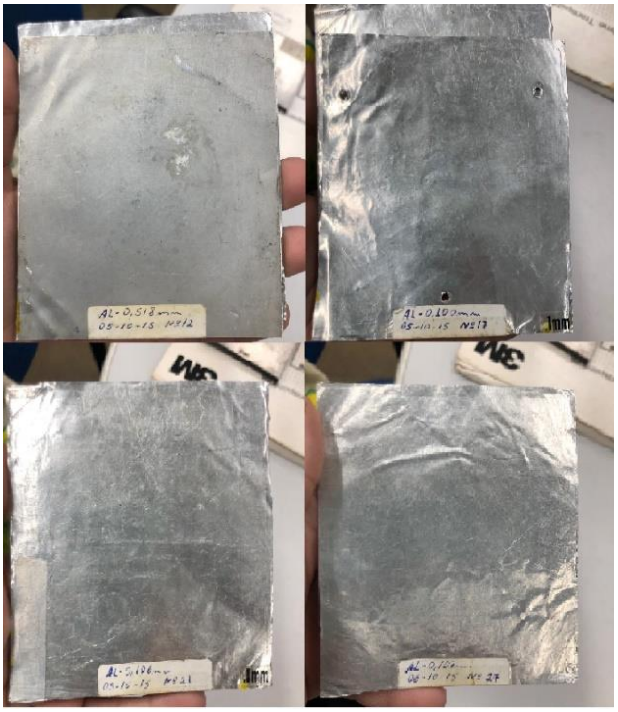
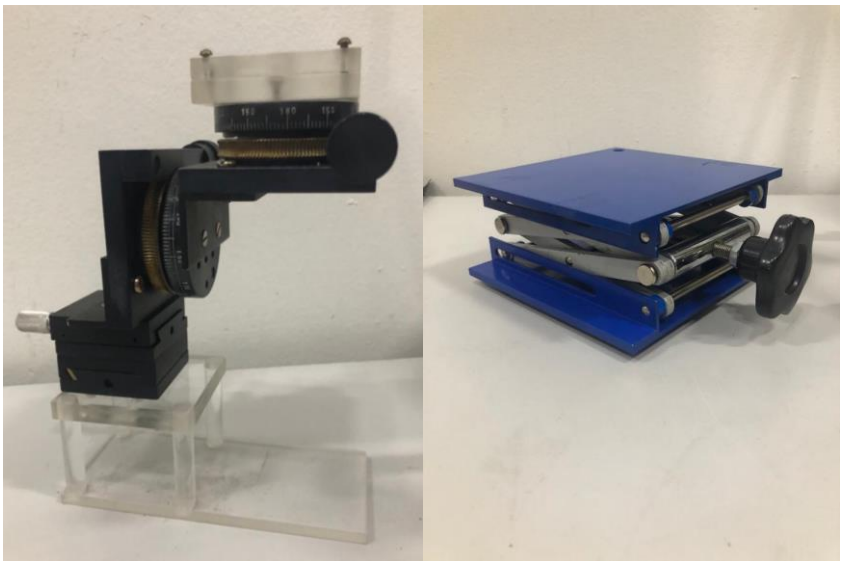


Figura 8 - Sistema de detecção usado no LABMETRO, à esquerda o detector de raios X e gama de CdTe modelo XR-100T da Amptek, à direita o espectrômetro da Amptek modelo PX5.

O detector foi colocado em frente à saída do feixe de raios X numa distância de 2,00 metros para medição da prata (Ag) e cobre (Cu) e 2,36 metros para medição de

PMMA e poliéster. O detector foi colocado sobre um apoio regulável que permite ajustes de altura.

Figura 9 - Suporte usado para o detector e apoio regulável de altura.



Conforme a Figura 10, uma placa de colimação foi usada para estreitar o feixe na saída do tubo um a 20 cm do tubo, com diâmetro de 1 cm e outros dois colimadores foram acoplados ao detector, um de 2000 μm, mais distal ao detector, e outro de 400 μm de diâmetro, mais próximo ao detector (Figura 11).

O critério de parada de contagem foi o tempo, como mostra a Tabela 2.

Tabela 2 - Tempos prescritos nos softwares como critério de parada das medições de contagens do espectro.

Número de espessuras	**Tempo real (s)**
0	300,00
1	350,00
2	350,00
3	400,00
4	450,00
5	500,00

Figura 10 - Sistema de colimação usado no LABMETRO para estreitar o feixe de raios X.

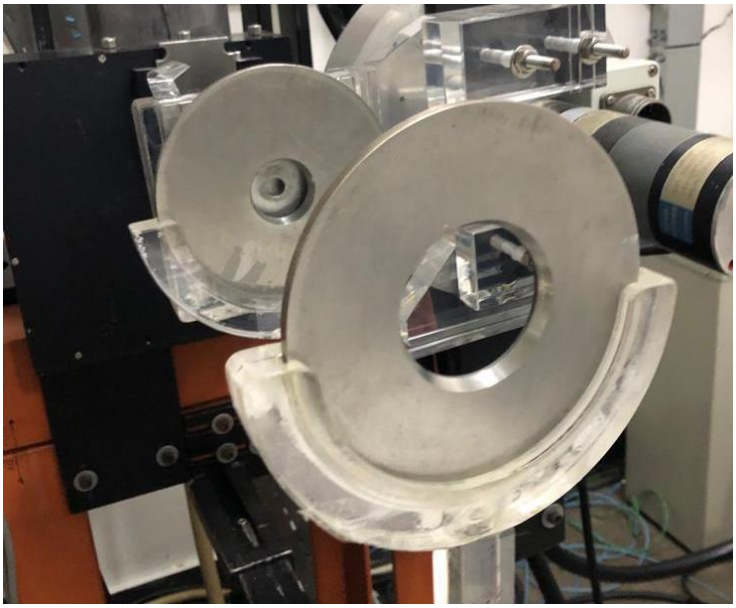
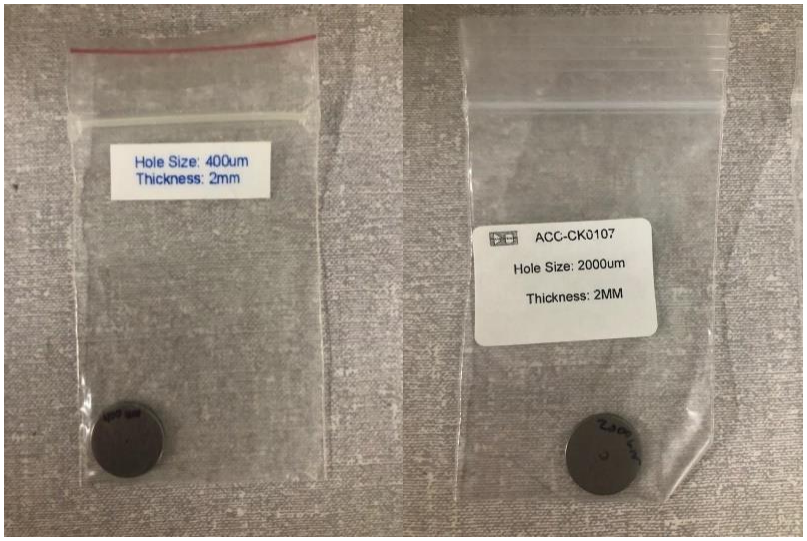


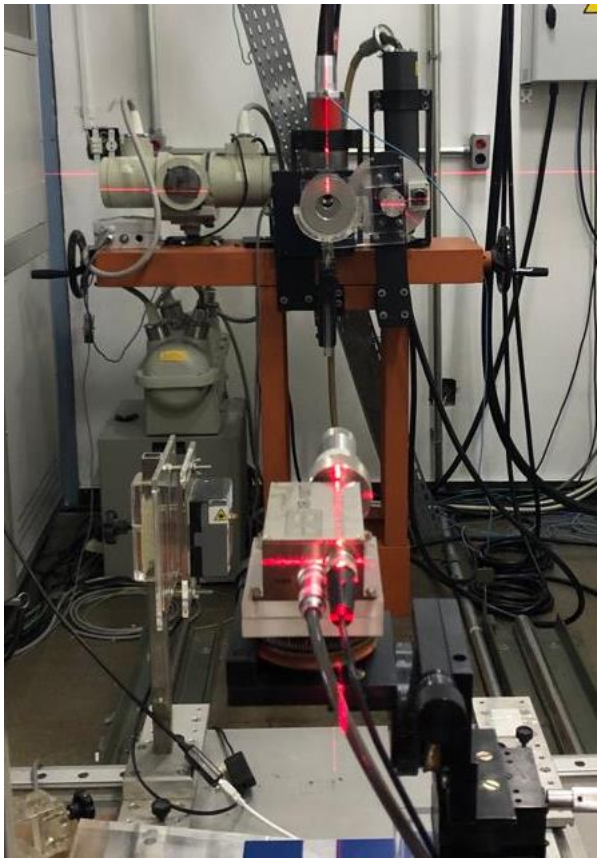
Figura 11 - Colimadores de 400 µm (à esquerda) e de 2000 µm (à direita) do LABMETRO.



O alinhamento foi feito com o auxílio de laser (Figura 12), monitorando o tempo morto, tempo em que o detector leva para separar dois eventos e registrá-los como dois pulsos separadamente, que pode ser determinado por características do próprio detector

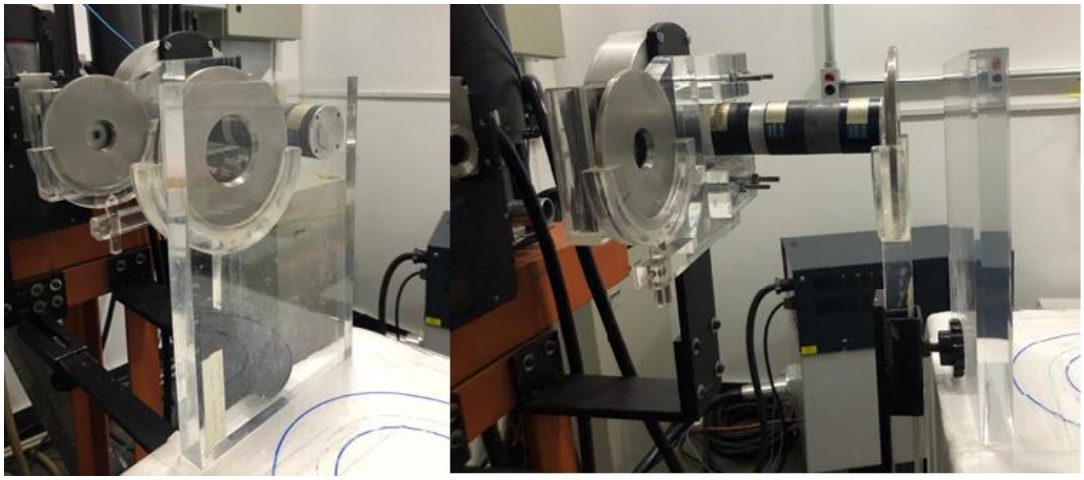
ou pelo sistema eletrônico associado. Quando o feixe está bem alinhado com o detector, as taxas de contagens são muito altas e o detector não é capaz de discriminar todas as contagens, havendo assim perdas de contagens. Quando isso acontece, falamos que as contagens do detector estão saturadas e o tempo morto possui um valor muito alto. Dessa forma, consideramos as posições de alinhamento onde o tempo morto entrava em saturação.

Figura 12 - Montagem experimental no LABMETRO mostrando o detector de CdTe sobre o suporte, a fonte de raios X com colimação e o laser de alinhamento.



As amostras de materiais foram posicionadas perpendicularmente a direção do feixe de raios X, seguindo a geometria *narrow beam*, discutida na subseção 2.5. Na Figura 13 é possível visualizar o posicionamento da placa de PMMA.

Figura 13 - Bloco de PMMA perpendicularmente ao feixe de raios X.



3.1.3 Laboratório de Radiação Gama e X da UFRJ

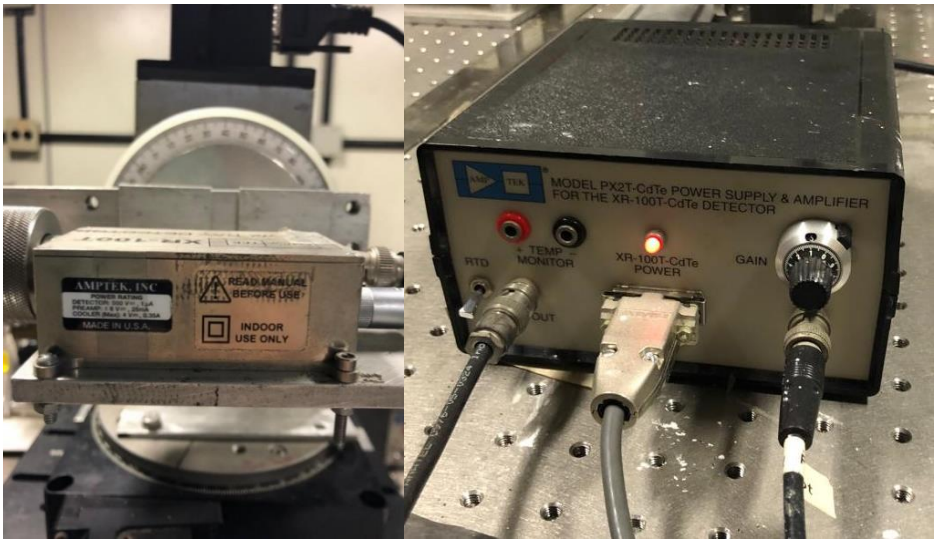
No LAFRAG, os elementos medidos foram: o alumínio e a resina dental. O equipamento usado foi um tubo de raios X industrial, modelo Isovolt 160 HS Pantak Seifert e um computador com o software multicanal da ORTEC. A Figura 14 mostra as especificações do tubo de raios X industrial do LAFRAG.

Figura 14 - Especificações do tubo de raios X industrial do LAFRAG.

O detector usado no LAFRAG foi o XR-100T de CdTe juntamente com um processador de pulsos modelo PX2T-CdTe, ambos da Amptek (Figura 15).

Linhas foram usadas para auxiliar visualmente no alinhamento do detector com a saída do tubo de raios X, como mostra a Figura 16. E, posteriormente, o alinhamento foi realizado com um controlador mecânico de posicionamento da Newport, chamado *ESP Series 3-Axis Motion Controller*, que permite rotacionar e transladar o detector nas direções x, y e z.

Figura 15 - Detector e espectrômetro do LAFRAG.



Com o programa, movemos o detector em todas as direções e, para cada uma, monitoramos as contagens, o critério de escolha da posição foi o tempo morto do detector, ou seja, a posição em que o tempo morto era maior. Logo após o alinhamento, uma folha de alumínio de 1,00 mm ± 0,01mm foi acoplada à saída do tubo para a filtração adicional e para reduzir o tempo morto à valores menores que 5% e para filtrar as linhas L do tungstênio.

Todos os espectros foram medidos com a mesma tensão e corrente e o critério de parada foi estabelecido para 1000 contagens no canal que correspondia à energia aproximada de 60 keV para o alumínio. Para a resina dental, prescrevemos tempos fixos

para cada espessura, os mesmos da Tabela 2. A Figura 17 mostra o posicionamento da resina dental e do alumínio.

Figura 16 - Montagem experimental para medição dos espectros de alumínio.

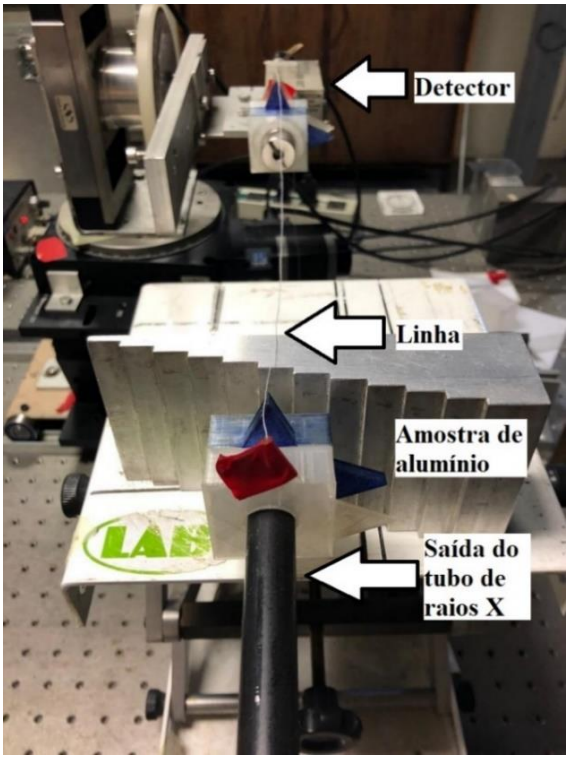
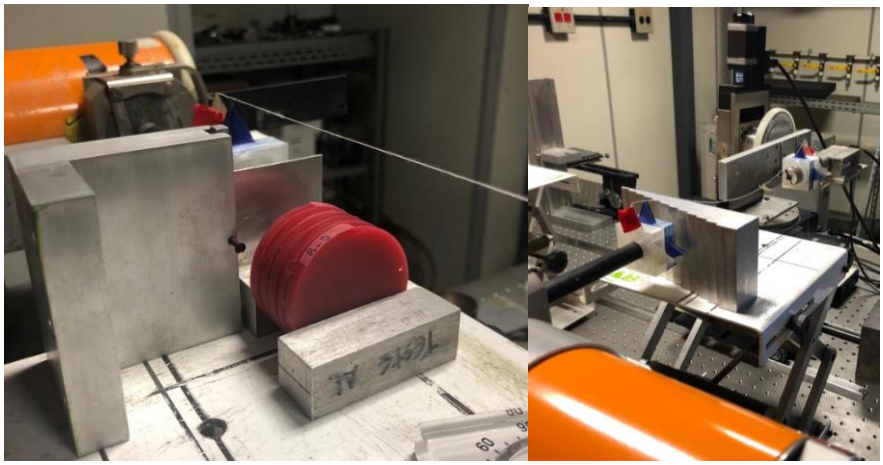


Figura 17 - Posicionamento dos materiais: (A) resina dental e (B) cunha escalonada de alumínio.



3.1.4 Materiais analisados

As medidas de espectros foram realizadas com alumínio (Al), cobre (Cu), prata (Ag), polimetilmetacrilato (PMMA), poliéster e resina dental. O Al, o Cu, a Ag e o PMMA possuem coeficientes mássicos de atenuação bem definidos na literatura, já, para o poliéster e a resina dental, foi necessário estudar a composição para estimar os valores de μ/ρ de referência. A Tabela 3 lista a marca, o modelo e a densidade dos materiais analisados.

Tabela 3 - Marcas e modelos dos materiais usados para medir coeficientes mássico de atenuação linear.

Material	**Marca**	**Modelo**	**Densidade (g/cm^3)**	**Número Atômico (Z)**
Alumínio	Gammex	Desconhecido	2,70	13
Cobre	Goodfellow	CU000491/3	8,93	29
Prata	Goodfellow	AG000305/6 AG000351/9	10,50	47
PMMA	Desconhecido	Desconhecido	1,19	6,24*
Poliéster	3M	PP 2910	1,39	-
Resina Dental	Technew	NewwaxU	0,99	-

* Número atômico efetivo.

A Tabela 4 lista as espessuras de todos os materiais analisados, bem como a incerteza nessas medidas. Cinco medidas de espessuras foram realizadas para cada material com um paquímetro (alumínio, poliéster e PMMA), com um micrômetro (resina dental) e seguindo as especificações do próprio fabricante e foi realizada a média dessas medidas. A Goodfellow, fabricante do cobre e prata, fornece uma incerteza de ± 15% do valor da espessura.

As amostras possuem diferentes formas, sendo o cobre e a prata em formato de folhas quadradas com borda bem definida. O PMMA e a resina dental são blocos de maior espessura, sendo o PMMA em formato quadrado e a resina dental em formato

redondo. O poliéster, agregado de folhas que grudaram umas nas outras, foi cortado em blocos retangulares, porém, sem forma bem definida. Uma cunha escalonada foi usada para as mediações com alumínio.

Tabela 4 - Espessuras das amostras de cada material testado.

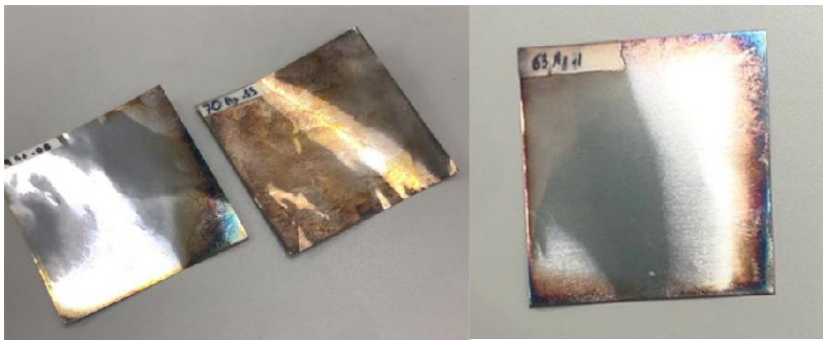
Amostra	Alumínio (mm)	Cobre (mm)	Prata (mm)	PMMA (mm)	Poliéster (mm)	Resina Dental (mm)
1	3,02 ± 0,01	0,050 ± 0,008	0,10 ± 0,02	5,01 ± 0,04	2,68 ± 0,05	5,09 ± 0,01
2	6,04 ± 0,01	0,10 ± 0,02	0,20 ± 0,03	10,12 ± 0,05	5,35 ± 0,06	10,54 ± 0,03
3	9,32 ± 0,02	0,15 ± 0,02	0,30 ± 0,05	15,02 ± 0,05	7,95 ± 0,05	16,08 ± 0,02
4	12,42 ± 0,01	0,20 ± 0,03	0,40 ± 0,06	20,00 ± 0,03	10,58 ± 0,04	20,89 ± 0,01
5	14,97 ± 0,02	0,25 ± 0,04	0,50 ± 0,08	25,01 ± 0,05	13,23 ± 0,05	26,34 ± 0,03

Abaixo, a Figura 18 mostra uma das folhas de cobre pertencentes ao LABMETRO, da marca Goodfellow (Tabela 3) e de alta pureza (99,99%).

Figura 18 - Folha de cobre usada para espectrometria e suas especificações.

As folhas de prata, também da marca Goodfellow e com pureza de 95,95%, estavam com as bordas oxidadas, entretanto, o feixe incide essencialmente sobre o centro da folha e, por isso, elas puderam ser usadas.

Figura 19 - Folhas de prata de 0,05 mm de espessura (esquerda) e de 0,10 mm de espessura (direita) usadas para mediação de espectros.

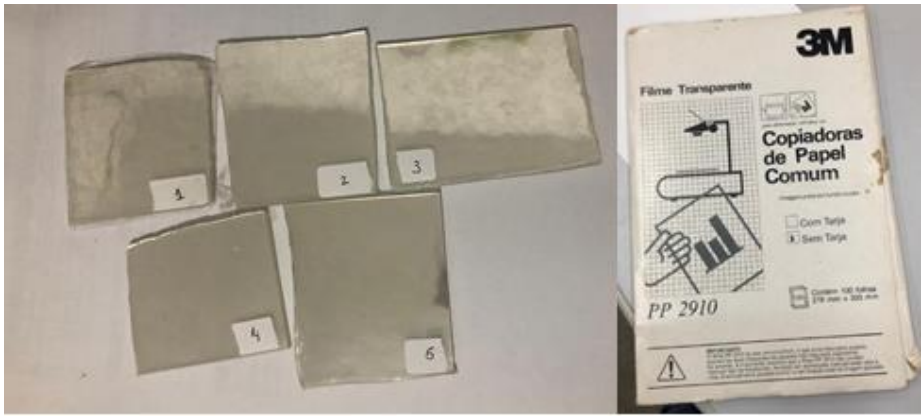


A cunha escalonada de alumínio pertence ao LAFRAG (Figura 20), com 99,9% pureza da Gammex® (Tabela 3).

Figura 20 - Cunha escalonada do LAFRAG.

Os blocos de poliéster compostos por filmes de transparência PPC para uso em copiadoras. Essas folhas são antigas e nunca usadas, com o passar do tempo elas grudaram entre si. Os blocos foram cortados e suas bordas lixadas com o auxílio de uma microrretífica da ATW RED modelo ARA 0172.

Figura 21 - Blocos de poliéster formados pela aderência de filmes de transparência uma as outras (esquerda) e pacote com especificações do material.



As placas de PMMA (Figura 22) foram cedidos pelo coordenador do LABMETRO, Leonardo Pacífico. O alumínio, o cobre, a prata e o PMMA possuem valores de referência no banco de dados do NIST XCOM, por isso, estes materiais serviram para validar a metodologia proposta através da comparação dos valores teóricos com os valores experimentais.

O PMMA e o poliéster foram especialmente escolhidos para serem analisados, pois fazem parte da composição do simulador produzido pelo Dr. João Emílio Peixoto, o *Phantom Mama* (BARRAGÁN, 2016).

Os blocos de resina dental (Figura 23) foram cedidos pelo professor João Emilio Peixoto e são materiais de fácil modelagem, baixa densidade e pouco atenuadores. Esta resina e o poliéster, por não possuírem valores tabelados no NIST XCOM, foram usados

para fazer um comparativo com outros tecidos e podem ser usados como materiais substitutos.

Figura 22 - Placas de PMMA usados no LABMETRO.

Figura 23 - Blocos de resina dental usados no LAFRAG.

3.2 CALIBRAÇÃO EM ENERGIA

A calibração consiste em procedimentos destinados a estabelecer uma correspondência entre uma grandeza conhecida e uma que se deseja medir. No caso da calibração em energia, estamos interessados em fazer uma correlação entre os canais do espectro medido e a energia pertencente a cada um deles. Para isso, usamos o espectro de Amerício-241, conhecido por ser um emissor de raios gama na energia de 59,54 keV.

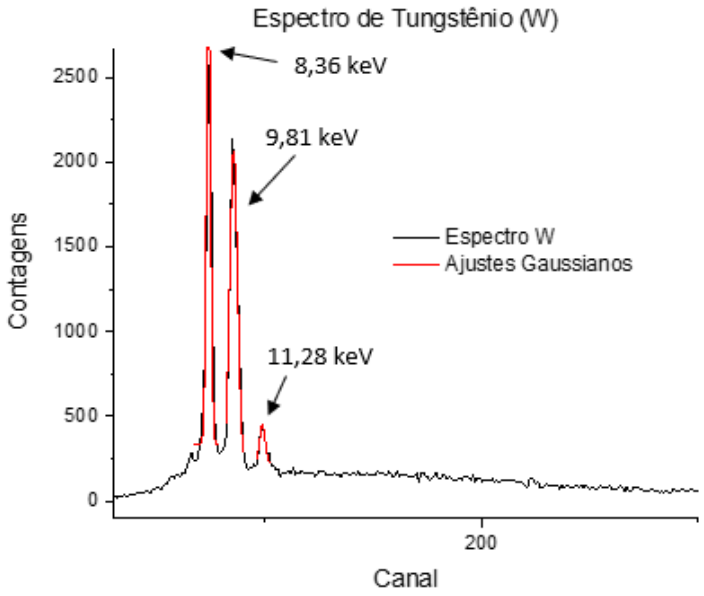
Além de fontes emissores de raios gama, a calibração também pode ser feita utilizando o próprio feixe de raios X, através das linhas de raios X característicos do elemento usado como anodo. Em ambos os laboratórios, LABMETRO e LAFRAG, o alvo do tubo de raios X é de Tungstênio (W), devido a isso, utilizamos o espectro do W mais o espectro monoenergético de uma fonte de Amerício-241.

Nos espectros adquiridos para calibração, foi realizado, em cada pico conhecido, um ajuste gaussiano pelo algoritmo de iteração Levenberg Marquardt, que nos fornece, com boa aproximação, o canal a qual o pico está posicionado, bem como sua incerteza.

A Figura 24 mostra um espectro de Tungstênio medido no LAFRAG ainda não calibrado. Nele, é possível notar nitidamente os picos de raios X característicos do W (linhas L). Como foi discutido na subseção 1.1, estes picos têm valores de energia bem definidos, dados pela diferença entre as energias de ligação das camadas envolvidas. O primeiro pico surge da transição de um elétron da camada M para a camada L, podendo ser $L_{\alpha 1}$ com energia de 8,39 keV ou $L_{\alpha 2}$ com energia de 8,33 keV. Devido a resolução do detector, estes dois picos podem se sobrepor e fizemos a média da energia, 8,36 keV. O segundo pico surge da transição de um elétron de uma camada mais distante da camada L, podendo ser $L_{\beta 1}$ (camada M) com energia de 9,67 keV ou $L_{\beta 2}$ (camada N) com energia de 9,96 keV, com média de 9,81 keV. O terceiro pico surge de raios X com energia de 11,28 keV, da camada O para a camada L.

Na Figura 24, além do espectro em preto, os ajustes gaussianos sobre os picos podem ser vistos em vermelho.

Figura 24 - Espectro polienergético de Tungstênio medido no LAFRAG com ajustes gaussianos para calibração em energia.



No caso do Am241, o espectro é monoenergético e apenas picos de emissões ou interações dos fótons emitidos com o detector podem ser visualizados na Figura 25. Nesta figura, os picos de emissão gama do próprio amerício tem energia de 59,54 keV e 26,35 keV (marcados em preto), há, também, os picos de raios X característicos da interação do gama de 59,54 keV com o Neptúnio-237 (produto do decaimento do Am241), marcados em azul e, marcados em vermelho, os picos de raios X de escape ou de fuga. Os picos de escape são resultados do escape de raios X secundários produzidos pelo Cd e pelo Te (raios X característicos) devido à interação com os raios gamas de 59,54 keV.

Como resultado dos ajustes gaussianos, temos tabelas como a Tabela 5, com uma coluna do canal nos espectros e a incerteza associada à sua posição e a energia correspondente a cada canal.

Figura 25 - Espectro discreto de Amerício-241 medido no LABMETRO com as indicações de energias dos picos observados.

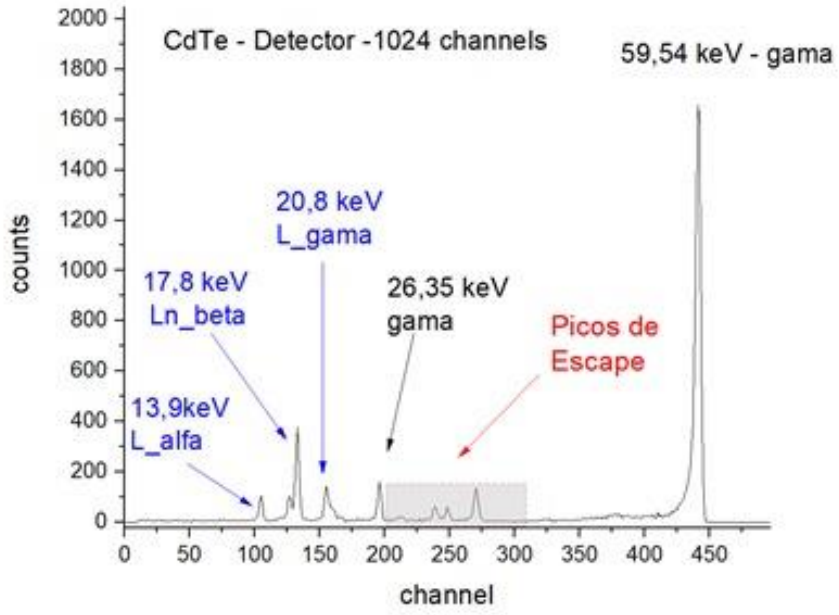
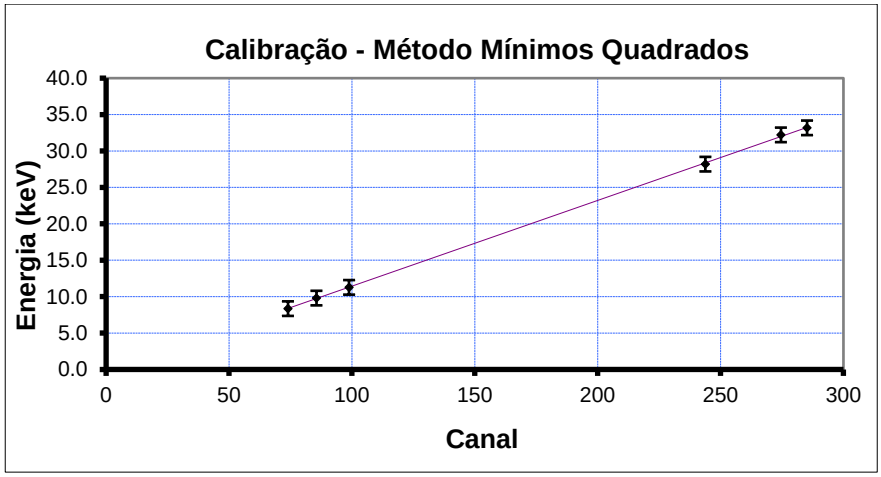


Tabela 5 - Tabela de dados para reta de calibração.

Canal	Energia (keV)	Elemento
74,0 ± 0,1	8,36	W
85,58 ± 0,09	9,81	
98,8 ± 0,2	11,28	
243,8 ± 0,2	28,19	
274,57 ± 0,09	32,2	Am
285,2 ± 0,2	33,17	
310,58 ± 0,04	36,46	
504,82 ± 0,06	59,54	

Sabendo a energia do pico e o canal em que ele está localizado, é possível plotar os gráficos das retas de calibração, conforme a Figura 26. O ajuste da reta é feito pelo Método dos Mínimos Quadrados.

Figura 26 - Reta de calibração usada para os espectros de alumínio.



Ao final, temos uma equação do tipo $y = ax + b$, onde y corresponde à energia do canal, a ao coeficiente angular da reta de calibração, b ao coeficiente linear da reta de calibração e x ao canal do espectro. Sendo assim, multiplicamos os canais, de 1 a 1024, pelo coeficiente angular e somamos ao coeficiente linear, convertendo canais em energia, ou seja, podemos converter canais em energia com a relação *Energia = a*canal + b*. Os coeficientes da Figura 26 obtidos foram:

- a = 0,1177 ± 0,0044
- b = -0,3 ± 0,9

3.3 CORREÇÃO DOS ESPECTROS

Antes de usar os dados espectrais para calcular os coeficientes mássicos de atenuação, submetemos os espectros brutos a correções que serão discutidas nas subseções a seguir.

3.3.1 Fator de normalização do mAs

A intensidade do feixe varia linearmente com o produto corrente-tempo (mAs) utilizado para produzir os raios X (BUSHBERG; ANTHONY SEIBERT; LEIDHOLDT JR; BOONE, 2012). Neste trabalho, para facilitar o experimento, medimos os espectros com diferentes tempos e, consequentemente, diferentes valores de mAs. Depois de medidos, utilizamos um fator de normalização para os diferentes valores de mAs, dado pela razão do mAs do espectro que está sendo avaliado pelo mAs utilizado para medir o maior valor de espessura estudado, neste trabalho chamamos essa espessura de N5.

O fator de normalização para os diferentes valores de mAs (FC_{mAs}) é dado pela equação abaixo:

$$FC_{mAs,i} = \frac{mAs_i}{mAs_{N5}} \tag{9}$$

onde $FC_{mAs,i}$ é o fator de normalização de mAs do especto i, mAs_i valor do mAs utilizado para medir o espectro i e mAs_{N5} valor do mAs utilizado para medir a maior espessura estudada.

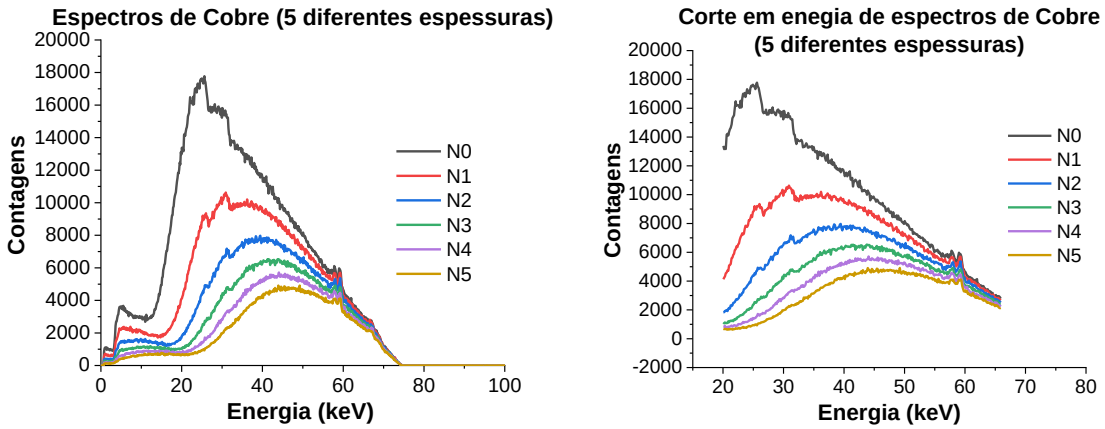
3.3.2 Energias de corte

Todos os espectros, depois de normalizados, sofreram um corte de energia para que canais com baixas contagens não influenciassem nos resultados. Inicialmente, os cortes foram realizados de forma a retirar os canais cujas contagens eram inferiores a 5% da maior contagem do espectro com a maior espessura atenuadora. Entretanto, notamos que ainda havia canais com baixas contagens. Dessa forma, a metodologia de corte em energia foi alterada.

A nova metodologia de corte leva em consideração as contagens em todos os seis espectros adquiridos. A Figura 27 mostra os exemplos dos espectros medidos com

absorvedor de cobre, vemos que, para N0, as contagens começam a aumentar aproximadamente na energia de 10 keV. Porém, os outros espectros não acompanham esse comportamento e isso refletiria na curva de atenuação e, consequentemente, no valor de μ. À vista disso, o corte em energia começa onde todos os espectros têm um comportamento crescente, no caso do cobre, isso acontece aproximadamente na energia de 20 keV. No caso do Cu, observamos nas energias finais dos espectros contagens dispersas, por isso, o corte foi feito na energia de 65 keV.

Figura 27 - Espectros brutos (esquerda) e com corte em energia (direita) de Cobre.



De forma mais resumida, o corte manual deve ser realizado onde as contagens no espectro com a maior espessura atenuadora (N5) começa a subir e terminar onde qualquer um dos espectros tenha contagem muito baixa, não podendo nenhum dos espectros ter contagem igual a zero. O espectro de background foi desconsiderado pois praticamente não interfere nas contagens.

Realizamos um corte de energia em cada espectro para pegar os canais com maior número de contagens e removendo canais que possuem contagem zero, pois durante a aplicação da equação algumas razões vão para infinito e o programa dá erro.

Para selecionar os intervalos de energias, utilizamos a Equação 10 para o cálculo da discrepância relativa percentual (D_r).

$$D_r = \left| \frac{x_{experimental} - x_{NIST\ XCOM}}{x_{NIST\ XCOM}} \right| * 100 \qquad (10)$$

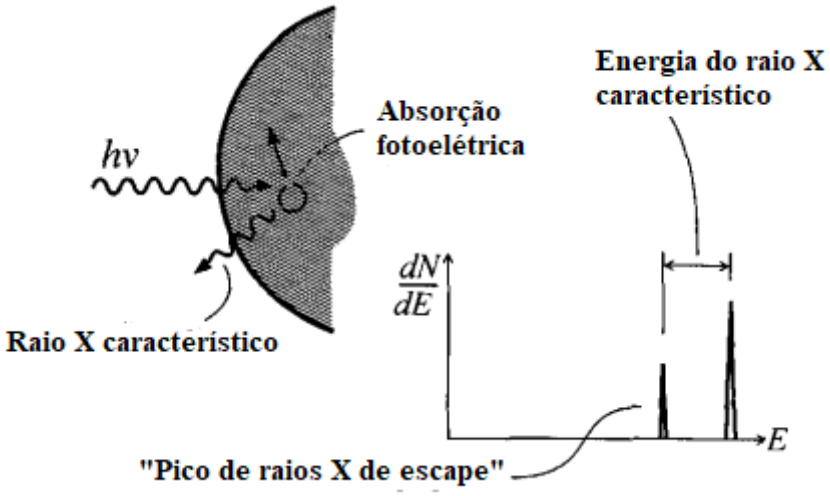
Onde $x_{experimental}$ é o valor de coeficiente mássico de atenuação linear obtido experimentalmente e $x_{NIST\ XCOM}$ é o valor de coeficiente mássico de atenuação linear obtido pelo bando de dados do NIST.

3.3.3 Correção de efeito de detecção no CdTe

Conforme discutido na subseção 2.4, os efeitos de detecção (raios X de escape, espalhamento Compton e efeitos de eficiência) foram corrigidos pela metodologia de *stripping*. Essa etapa foi realizada no programa Corresp, escrito no Matlab e aprimorado por Santos (2013). Os dados de entrada no programa foram os espectros primários e transmitidos, parâmetros de calibração e diâmetro dos colimadores.

A correção dos picos de escape de raios X é baseada primeiramente em produzir uma curva que exiba a probabilidade de escape de raios-X característicos produzidos após N interações (ηk) estimada por meio simulação de Monte Carlo. Dessa forma, é possível remover as contagens de pico de escape de um canal qualquer n do espectro de *bremsstrahlung*, já que estas contagens tem energia igual à diferença entre a energia do fóton incidente ($Einc$) e a energia de borda K do detector de CdTe ($Ekedge$) (DO NASCIMENTO; SANTOS; MACEDO ; PACÍFICO *et al.*, 2021). A Figura 28 representa a produção dos raios X característicos antes do escape do detector de CdTe.

Figura 28 – Exemplo do esquema do processo que dá origem aos raios X de escape (a) e o pico resultante no detector com volume detector de gás xenônio (b) .



Fonte: Adaptado de KNOLL, 2000.

Para corrigir o espalhamento Compton, são determinados a energia de borda de Compton, a probabilidade de deposição parcial de energia por efeito Compton e a altura do platô Compton. As contagens são removidas usando a altura do platô, desde a borda Compton até o canal zero. Essas contagens perdidas, que foram removidas dos canais a qual não são realocadas ao seu canal original pela correção de eficiência. A correção das contagens em cada canal é realizada dividindo pela eficiência de detecção (DO NASCIMENTO; SANTOS; MACEDO ; PACÍFICO *et al.*, 2021).

3.3.4 Cálculo da energia média

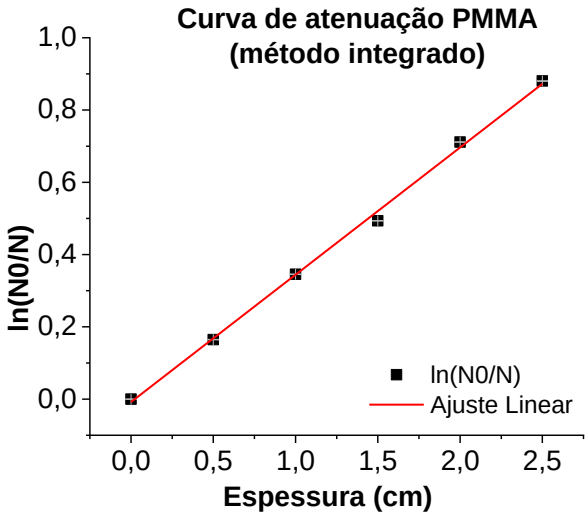
De acordo com a subseção 1.3, a energia média é calculada em função de todas as contagens por canal sobre a área total do espectro. No nosso caso, temos ao todo 36 espectros divididos em 6 materiais diferentes. Para todos eles as energias médias foram calculadas fazendo o somatório do produto das contagens pela energia de cada canal dividido pelo somatório das contagens de todos os canais do espectro, conforme a Equação 1. Como os espectros foram corrigidos pelo programa Corresp (SANTOS, 2013;

TOMAL; SANTOS; COSTA; LOPEZ GONZALES *et al.*, 2014), as energias médias foram calculas para os espectros com correção e sem correção.

3.4 CÁLCULO DO COEFICIENTE MÁSSICO DE ATENUAÇÃO USANDO ESPECTROS POLIENERGÉTICOS

No método integrado, usamos o somatório das contagens do feixe primário e do feixe transmitido para calcular o μ/ρ de cada espessura, conforme a Equação (5). Com os valores de transmissão corrigidos pelo fator de calibração de mAs, plotamos uma curva de atenuação (Figura 29) onde foi realizado um ajuste linear na curva de atenuação logarítmica e obtivemos os valores de coeficiente mássico de atenuação linear e comparamos com os valores de referência, tanto nos espectros corrigidos como nos espectros sem correção.

Figura 29 - Curva de atenuação do PMMA pelo método integrado.



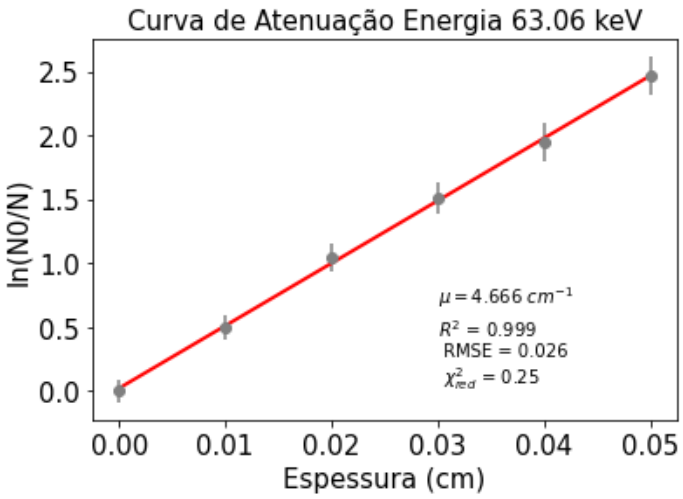
A curva ajustada foi $y = ax + b$, em todos os materiais. O coeficiente de atenuação μ foi obtido pelo coeficiente angular da reta e o coeficiente mássico dividindo μ por ρ. Como temos um espectro polienergético o valor de μ é correspondente à energia média

do espectro. Portanto, para fazer o comparativo dos valores medidos com os valores do NIST usamos a energia média do espectro primário (N0).

No método canal a canal, a Equação 6 é aplicada a cada energia do espectro, portanto, são encontrados valores de coeficiente de atenuação para cada canal que compõe o espectro. Para melhorar a confiabilidade do valor de μ encontrado, usamos cinco espessuras diferentes de amostra como meio atenuador. Curvas de atenuação, intensidade relativa do feixe (IR) versus espessura do material (x), foram obtidas desses espectros para energia de cada fóton. Devido ao grande volume de cálculos e gráficos, para este método, desenvolvemos um programa que será melhor discutido na próxima subseção (3.5).

A Figura 30 apresenta um exemplo de curva de atenuação para PMMA para a energia 15,05 keV. A linha vermelha representa o ajuste de uma função linear. Como este procedimento é repetido para todas as energias do espectro e depois do corte de energia os espectros deste trabalho ficaram com cerca de 450 valores de energia. Por isso, foi necessário criar uma rotina em Python para fazer esse ajuste repetidas vezes num *loop,* gerando os valores de μ e parâmetros estatísticos do ajuste.

Figura 30 - Exemplo de curva de atenuação do PMMA para energia 63,06 keV pelo programa em Python.



3.5 PROGRAMA EM PYTHON

O programa foi desenvolvido no software Anaconda, cuja linguagem de programação é o Python. Todo o código foi estruturado através do ambiente Spyder. Como referencial teórico usamos o livro *Numerical Methods in Engineering with Python 3* (KIUSALAAS, 2013), que foi essencial para o desenvolvimento e entendimento dos comandos do programa. O código foi desenvolvido para possibilitar que, após validado, novos usuários possam usá-lo para calcular os coeficientes mássicos de atenuação e caracterizar materiais pelo método canal a canal, proposto neste trabalho. O programa incialmente importa as bibliotecas necessárias para os cálculos e um arquivo em formato .txt com os dados dos coeficientes de atenuação de referência com as suas respectivas energias, dados retirados do NIST XCOM (BERGER; HUBBELL; SELTZER; CHANG *et al.*, 2010). Além dos valores de coeficiente de atenuação mássico linear de referência o programa precisa também importar os dados experimentais de uma tabela de dados do Excel com: espessuras, canais do espectro, calibração, energia calibrada, valores de mAs, espectros brutos, espectro corrigidos e espectro com corte de energia e um gráfico dos espectros. Também é necessário informar o valor da densidade do material atenuador usado. Os espectros que o programa usa passaram pelas correções discutidas na subseção 3.4.

3.5.1 Linearização da curva de atenuação

Para simplificar os cálculos do μ pelo programa, nós convertemos a exponencial da Equação (3) em uma função linear, isso pode ser feito usando uma propriedade logarítmica que define que $\ln(e^x) = x$. Dada a Equação (3), temos:

$$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\mu \cdot x \tag{11}$$

$$\ln\left(\frac{I_0}{I}\right) = \mu \cdot x \tag{12}$$

Se aplicarmos a Equação (11) na equação da reta, $y = ax + b$, onde $\mathrm{y} = \ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$, $a = \mu$ e $b = 0$. Sendo assim, no método canal a canal, as curvas de atenuação foram plotadas com eixo y igual a $\ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$ e no eixo x as espessuras dos materiais.

O programa separa os espectros cortados, as espessuras de material atenuador e cria uma tabela de $\ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$, com suas respectivas incertezas. Com esses dados, o programa plota gráficos de espessura por $\ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$ e, através de uma função de regressão linear, faz o ajuste um ajuste linear.

O programa retorna o valor do coeficiente de regressão, que será o coeficiente de atenuação linear, bem como sua incerteza. Com o valor de densidade, o programa retorna todos os coeficientes mássicos de atenuação para cada curva de cada energia do espectro e cria um documento de Excel chamado “Output” que grava esses dados.

3.5.2 Métricas estatística para análise da regressão linear

Algumas métricas estatísticas também são calculadas pelo programa, como: erro médio absoluto, erro quadrático médio, raiz quadrada do erro médio (RMSE) e o χ^2 reduzido para avaliar o ajuste em relação aos pontos da curva.

O erro médio absoluto, erro quadrático médio e raiz quadrada do erro médio (RMSE) são métricas relacionadas as diferenças entre os valores previstos pelo modelo e os valores observados e se relacionam pelas equações (13), (14) e (15). Os valores de

RMSE são plotados nos gráficos do programa, de tal forma que quanto mais próximo o valor de zero melhor é o ajuste em relação aos dados experimentais.

$$Erro\ médio\ absoluto = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(Y_{experimental} - Y_{previsto}\right) \quad (13)$$

$$Erro\ quadrático\ médio = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(Y_{experimental} - Y_{previsto}\right)^2 \quad (14)$$

$$Raiz\ quadrada\ do\ erro\ médio\ = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(Y_{experimental} - Y_{previsto}\right)^2} \quad (15)$$

3.5.3 Gráficos

Foi definido um plotador que define um espaçador entre as imagens, pois os espectros podem ter muitos valores de energias, sendo necessário um longo tempo para plotar um gráfico por energia. O usuário pode definir o espaçador ou, se preferir, plotar todas as imagens. As curvas de atenuação são gravadas em uma pasta chamada “image”, que deve ser criada pelo usuário no diretório que contém os dados experimentais e o programa. O programa também plota os valores de coeficiente mássico de atenuação linear encontrados experimentalmente e os valores do NIST XCOM, sendo possível uma comparação visual dos resultados obtidos. Também é necessário criar uma pasta chama “mi” para o programa gravar a curva de comparação dos coeficientes.

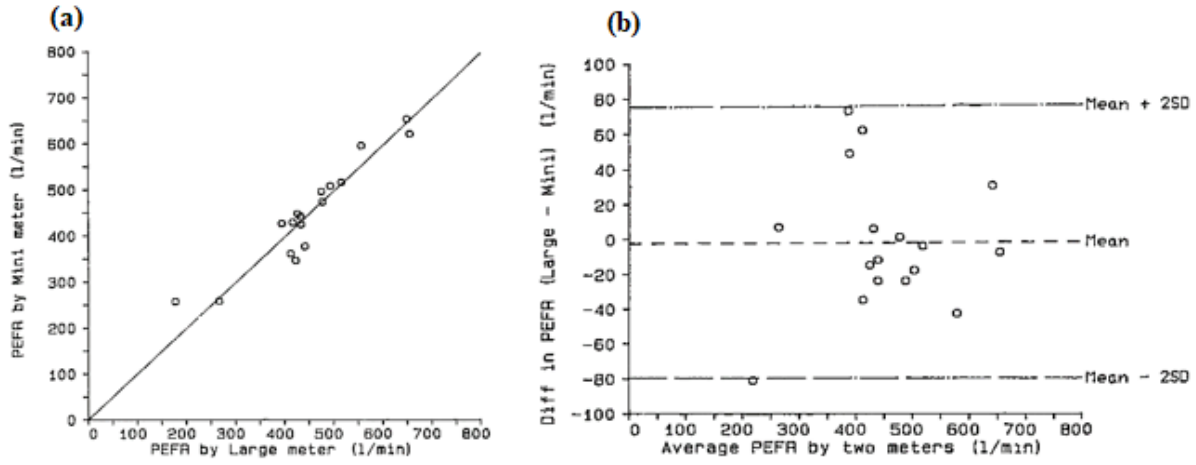
3.5.4 Testes estatísticos

Ao desenvolver uma nova metodologia, é comum comparar os resultados obtidos com os valores de referência de uma metodologia já estabelecida. Essa comparação tem

por objetivo ver o quantos esses valores se correlacionam para que a nova metodologia seja validada.

No programa, desenvolvemos as avaliações discutidas por Bland e Altman (BLAND; ALTMAN, 1986). Uma primeira análise qualitativa foi realizada através da visualização de um gráfico de valores medidos (método proposto) pelos valores obtidos na metodologia já conhecida (NIST XCOM). Através desse gráfico traçamos uma linha de igualdade, que simula uma situação ideal onde os pontos referentes aos dois métodos têm valores iguais. Assim, podemos aferir visualmente o grau de concordância entre as medidas (BLAND; ALTMAN, 1986). A análise desenvolvida por Bland e Altman visa quantificar o quanto os métodos diferem. Um segundo gráfico proposto pelos autores exibe, no eixo x, a medição média do conjunto de dados e, no eixo y, a diferença nas medições entre os valores em cada metodologia. A Figura 31 mostra os gráficos do artigo de Bland e Altman como exemplo.

Figura 31 - Comparação de dois métodos de medição da taxa de pico de fluxo expiratório (PEFR) (a). Diferença contra a média para dados PEFR (b).



Fonte: Bland and Altman, 1986.

O programa calcula diferença média ($\bar{d}$) e o seu desvio padrão (S_d), entre os valores de cada metodologia, que é mostrada na Figura 31(b) como uma linha tracejada intitulada de *mean.* Essa diferença, também chamada de viés (tradução do inglês *bias*) é um bom indicador para avaliar se um método é ou não tendencioso e, se for, ela quantifica esse viés. Além da diferença média, o programa calcula os limites de concordância definidos como $\bar{d} \pm 1{,}96 \cdot S_d$, dentro dos quais as diferenças são consideradas normalmente distribuídas (BLAND; ALTMAN, 1986).

Por fim, o programa calcula e nos retorna o coeficiente de correlação r de Pearson, que é bastante usado para comparar dados. Entretanto, este coeficiente mede apenas o quanto as duas metodologias se relacionam e não o quanto elas concordam entre si. Portanto, se todos os pontos da Figura 31(a) estiverem na linha de igualdade estes dados concordam perfeitamente, mas, basta esses pontos estarem em outra linha qualquer para se correlacionarem perfeitamente. Juntamente com o coeficiente de correção r é dado seu intervalo de confiança e o valor de p.

3.6 ANÁLISE DAS INCERTEZAS

Num espectro de raios X, as incertezas estão diretamente associadas ao número de eventos (contagens) registrados. O número de contagens em cada canal de um espectro de raios X, bem como o número total de contagens registrados no espectro (a soma de todas as contagens) obedece a estatística de Poisson (VAN GRIEKEN; MARKOWICZ, 2001).

A distribuição de Poisson é usada para representar o resultado de um experimento com variáveis aleatórias discretas (FREIRE, 2021). Essa distribuição é usada quando os eventos são raros e sua ocorrência é observada dentro de um intervalo de tempo finito, que é o caso das medições de espectros de raios X pela detecção dos fótons no detector. Supondo que ocorram N_o eventos em média em um intervalo de tempo, para calcular a probabilidade de observar N contagens de fótons de raios X no detector usamos a Equação (16):

$$P(N, N_0) = \frac{N_0^N}{N!} e^{-N_0} \tag{16}$$

A incerteza associada às N contagens é $\sqrt{N}$.

A incerteza nos valores de μ/ρ pelo método integrado foi propagada levando em conta a incerteza da energia, incerteza das contagens e incerteza das medidas das espessuras. A incerteza da energia foi obtida pela propagação de incerteza da equação da reta de calibração com os valores de coeficientes angular e linear e o erro associado a cada um deles, respectivamente. No caso das contagens N dos espectros, consideramos uma incerteza de $\sqrt{N}$. As medições de espessuras x acompanham a incerteza do instrumento usado para medir (micrômetro ou paquímetro). Sendo a energia média $E_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_i \cdot N(E_i)}{\sum_i^n N(E_i)} = \frac{A}{B}$:

$$\sigma_{\frac{A}{B}} = \frac{A}{B} \sqrt{\left(\frac{\partial A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\partial B}{B}\right)^2} \tag{17}$$

Fizemos a propagação e chegamos à equação final para a incerteza da energia média:

$$\sigma_{\frac{A}{B}} = E \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} {E_i}^2 \cdot N(E_i) + \sum_i^n \left[N(E_i) \cdot \sigma_{E_i}\right]^2}{(\sum_{i=1}^{n} E_i \cdot N(E_i))^2}} \tag{18}$$

Como tivemos que estimar a densidade do poliéster, estimamos também a incerteza desta medida pela incerteza da balança usada.

Para a método canal a canal, a incerteza foi propagada a partir da equação da reta, de tal forma que, se $y = ln\left(\frac{N_0}{N}\right)$ e $a = \mu$ e considerando que $u = \frac{N_0}{N}$, temos que:

$$\sigma_y^2 = \left(\frac{\partial y}{\partial u}\right)^2 \cdot {\sigma_u}^2 \tag{19}$$

$$\sigma_y = \left(\frac{N}{N_0}\right) \cdot \sqrt{\left(\frac{{N_0}^2}{N^3}\right) + \left(\frac{N_0}{N^2}\right)} \tag{20}$$

A incerteza de μ é dada pela incerteza de a no programa.

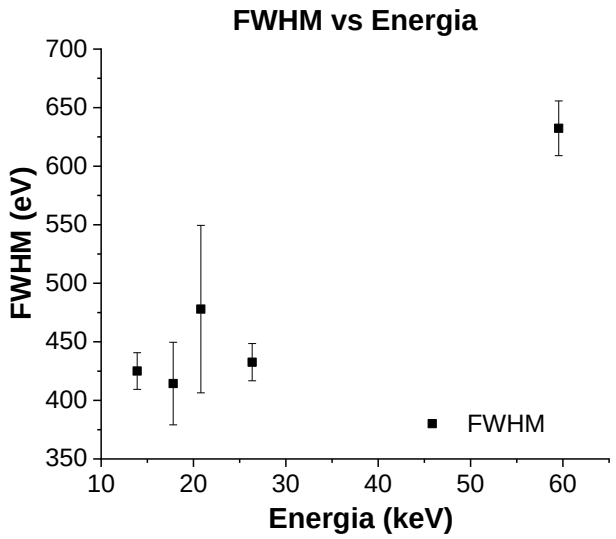
4. RESULTADOS

Nesta seção serão exibidos os espectros experimentais medidos e os gráficos e tabelas com os resultados de μ/ρ para as duas metodologias apresentadas na subseção 3.4. Também iremos apresentar comparações entres os valores obtidos experimentalmente e os valores do NIST.

4.1 RESOLUÇÃO DO DETECTOR

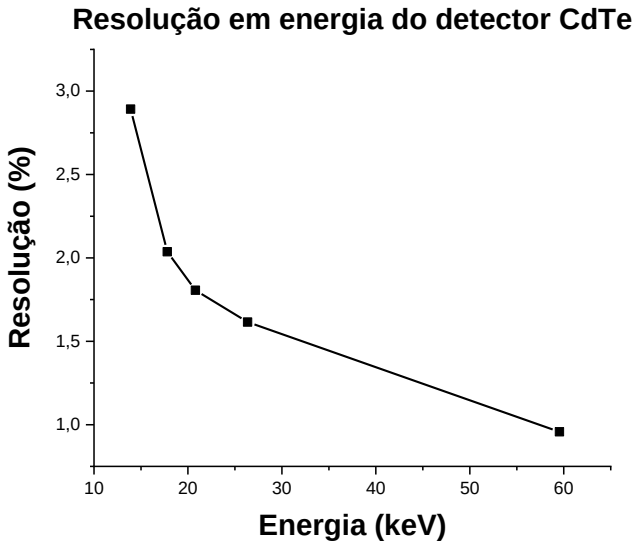
Realizamos também uma análise para ver como se comporta a resolução do detector. Com dados de FWHM (largura meia altura) dos picos de Am241 plotamos o gráfico da Figura 32.

Figura 32 - Gráfico de FWHM pela energia em keV para avaliação da resolução do detector.



Com os valores de FWHM e energia chegamos ao gráfico de resolução do detector de CdTe (Figura 33) e notamos que a resolução em energia desse detector diminui com o aumento da energia

Figura 33 - Resolução em energia do detector de CdTe.



A resolução do detector é um parâmetro que deve afetar os resultados da metodologia proposta uma vez que se o detector não consegue diferenciar duas energias de fótons muito próximas, parte das contagens dessas energias devem aparecer sobrepostas em uma energia ligeiramente diferente. No entanto, não mensuramos diretamente o efeito disso. A proposta deste trabalho foi mostrar experimentalmente que considerando que cada canal regista apenas uma energia podemos aplicar a metodologia proposta e encontrar valores dos coeficientes de atenuação próximos do esperado. A mesma consideração é feita em trabalhos na literatura que abordam correções espectrais tais como o trabalho do Di Castro (DI CASTRO; PANI; PELLEGRINI; BACCI, 1984)

4.2 ESPECTROS MEDIDOS

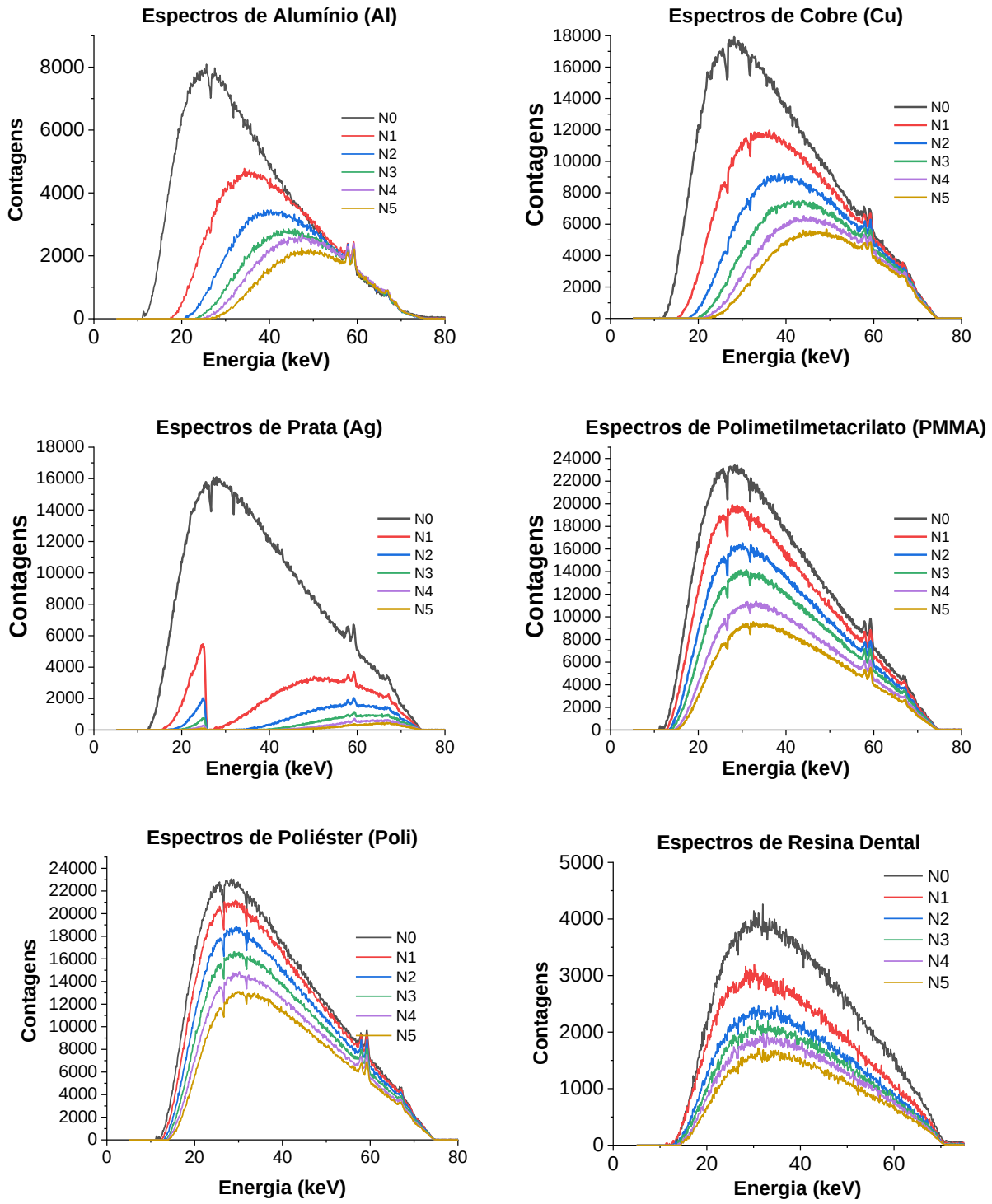
Os espectros brutos passaram pelas correções apresentadas na subseção 3.3 e serão apresentados aqui em gráficos de contagens pela energia em keV. Para todos os materiais estudados, todos os seis espectros corrigidos (transmitidos por diferentes espessuras de material) foram plotados no mesmo gráfico, conforme a figura abaixo, onde N0 são as contagens medidas com o feixe primário, N1 são as contagens medidas com o feixe transmitido pela espessura 1, N2 são as contagens medidas com o feixe transmitido pela espessura 2 e assim por diante até chegar a N5, as contagens medidas com o feixe transmitido pela maior espessura de material. A Figura 34 mostra os espectros experimentais.

Os espectros com maiores contagens foram os espectros transmitidos pelos materiais PMMA, poliéster, cobre e prata. Já os espectros transmitidos por alumínio e resina dental não passaram de 8000 contagens e 4500 contagens, respectivamente. As baixas contagens das medições com resina dental atribuíram aos espectros curvas mais ruidosas.

Dentre os seis materiais analisados, a partir dos gráficos, é possível notar que a prata é o material que mais atenua o feixe de raios X. Este fato concorda com seu maior número atômico em relação aos demais materiais. Além disso, o gráfico da prata apresenta sua borda K de absorção na energia de 25,5 keV.

Nos espectros corrigidos da Figura 34, é possível notar pontos em que a correção removeu contagens nos canais que correspondem as energias da borda K de absorção. Além disso, nos espectros transmitidos por todos os materiais, com exceção da resina dental, é notória a presença de dois picos das linhas de emissão das camadas K do Tungstênio nas energias 57,98 keV e 59,32 keV.

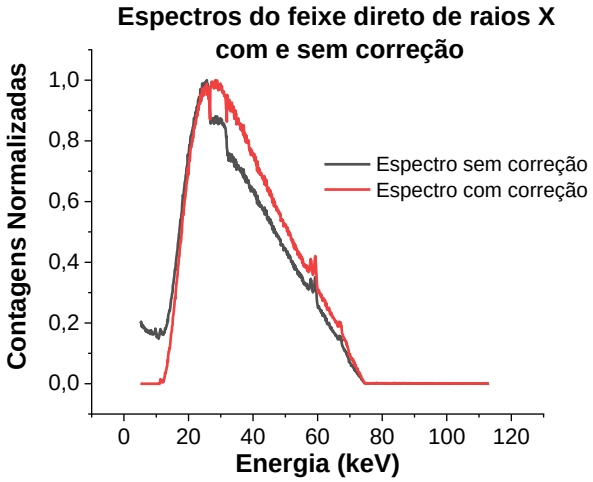
Figura 34 - Espectros medidos por seis diferentes espessuras e diferentes materiais.



4.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS ESPECTROS CORRIGIDOS E ESPECTROS SEM CORREÇÃO

O gráfico da Figura 35 mostra dois espectros do feixe direto com correção e sem correção, sendo a curva em preto o espectro sem correção pela metodologia *stripping* e a curva vermelha o espectro com correção. As contagens foram normalizadas pela maior contagem no espectro.

Figura 35 - Espectro do feixe direto medido no LABMETRO antes e depois de passar pela correção de *stripping*. Espectro normalizado pelo máximo de contagens registradas.



Fonte: Elaborado pelo autor

Ao comparar qualitativamente os dois espectros podemos notar algumas diferenças:

- A correção remove contagens em baixas energias, que são provenientes de efeito Compton no detector;
- O espectro corrigido possui uma forma mais uniforme;
- A correção aumenta as contagens nos canais mais centrais.

Sendo assim, os espectros corrigidos foram comparados com os espectros sem correção em termos da energia média do espectro (Tabela 6). Foi observado que, em todos os casos, a energia média dos espectros aumenta com a correção. Isso acontece porque a correção elimina contagens indevidas de baixas energias, provavelmente devido a efeito Compton e escape de fótons.

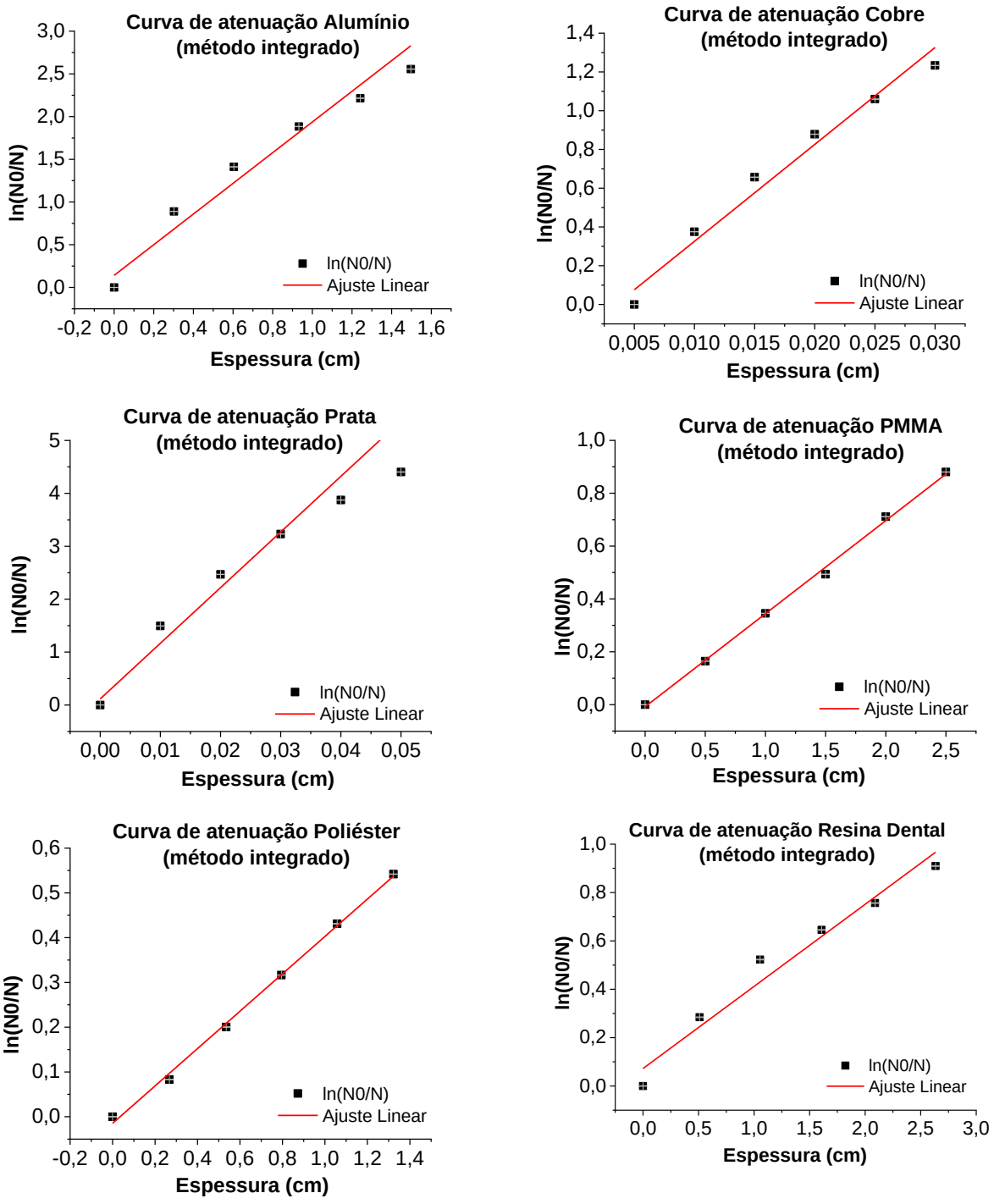
Tabela 6 - Comparação das energias médias dos espectros antes e depois de serem corrigidos.

	Energia Média Sem Correção (keV)	**Energia Média Com Correção (keV)**
Material	**N0**	**N0**
Alumínio	32,4 ± 0,2	34,7 ± 0,1
Cobre	35,0 ± 0,2	37,5 ± 0,2
Prata	35,2 ± 0,2	37,8 ± 0,2
PMMA	34,9 ± 0,2	37,4 ± 0,2
Poliéster	34,9 ± 0,2	37,4 ± 0,2
Resina Dental	47,6 ± 0,4	-

4.4 COEFICIENTES MÁSSICOS DE ATENUAÇÃO (MÉTODO INTEGRADO)

Como resultado pelo método que chamamos de integrado obtivemos seis curvas de atenuação para os espectros sem correção (Figura 36), uma para cada material. Os gráficos apresentam no eixo y o valor de $\ln(N_0/N)$ e no eixo x os valores de espessura em centímetros. As barras de erro são exibidas em cinza em cada ponto experimental.

Figura 36 - Curvas de atenuação dos seis materiais analisados pelo método integrado para espectros sem correção de *stripping.*



Os pontos (0,0) são devido ao $\ln(N_0/N_0)$, que ocorre em um caso ideal em que nenhum fóton é atenuado. Conforme o modelo teórico discutido em 3.5.1, o modelo experimental escolhido para o ajuste dos dados é linear. No entanto, em alguns casos, a reta não se a justa tão bem aos pontos experimentais. Isso acontece devido a algum fator experimental, provavelmente as contagens espectrais, que ainda deve ser melhor analisado.

Os valores de μ/ρ foram calculados e comparados, conforme a Tabela 7. Para todos os valores de μ/ρ foi calculada a discrepância relativa percentual, que é uma medida de diferença do valor medido com o valor de referência normalizado pelo valor de referência em porcentagem. Note que os valores de referências (NIST XCOM) são diferentes porque os espectros com e sem correções apresentam energias médias diferentes.

Tabela 7 - Valores de coeficientes mássicos de atenuação dos materiais estudados pelo método integrado, obtidos por espectros com e sem correção, e comparados com os valores de referência para a energia média do feixe direto.

	μ/ρ Sem Correção (cm^2/g)			**μ/ρ Com Correção (cm^2/g)**		
Elementos	**Experimental**	**NIST XCOM**	**Discrepância (%)**	**Experimental**	**NIST XCOM**	**Discrepância (%)**
Alumínio	0,67 ± 0,07	0,93	26	0,67 ± 0,04	0,78	12
Cobre	6,7 ± 0,2	7,09	6	5,8 ± 0,2	5,81	1
Prata	10 ± 1	24,16	59	10,4 ± 0,9	20,02	48
PMMA	0,296 ± 0,007	0,264	12	0,348 ± 0,004	0,246	17
Poliéster	0,300 ± 0,007	-	-	0,30 ± 0,01	-	-
Resina Dental	0,34 ± 0,03	-	-	0,37 ± 0,07	-	-

A comparação da Tabela 8, mostra os μ/ρ pelo método integrado com espectros que antes e depois de passarem pela correção de *stripping*. A discrepâncias relativas diminuíram para todos os materiais nos espectros corrigidos, exceto para o PMMA. O

cobre obteve resultado compatível. A discrepância da prata é bastante alta em relação ao valor do NIST XCOM, este fato pode ser causado pela presença da sua borda de absorção. Estes valores foram obtidos para o espectro completo (energias de 5 keV até o final), computando canais com baixas contagens.

Como não temos a informação da composição química do poliéster e da resina dental não foi possível obter os valores de referência tabelados pelo NIST para comparação.

4.5 CURVAS DE ATENUAÇÃO (MÉTODO CANAL A CANAL)

O primeiro resultado que o programa em Python retorna, pelo método canal a canal, são as curvas de atenuação. Todas os gráficos possuem barras de erros, entretanto, em alguns pontos o erro é menor do que o tamanho do ponto e, por isso, as barras de erro não são visualizadas.

Para definir qual dos intervalos se obtêm os melhores resultados, calculamos a discrepância relativa para todos os canais do espectro, ou seja, de todos os coeficientes de atenuação mássico medidos experimentalmente em relação aos valores tabelados pelo NIST XCOM e calculamos a média das discrepâncias. Escolhemos o intervalo de energias com a menor média de discrepância relativa. Os intervalos de energias que usamos para obter os resultados estão na Tabela 8.

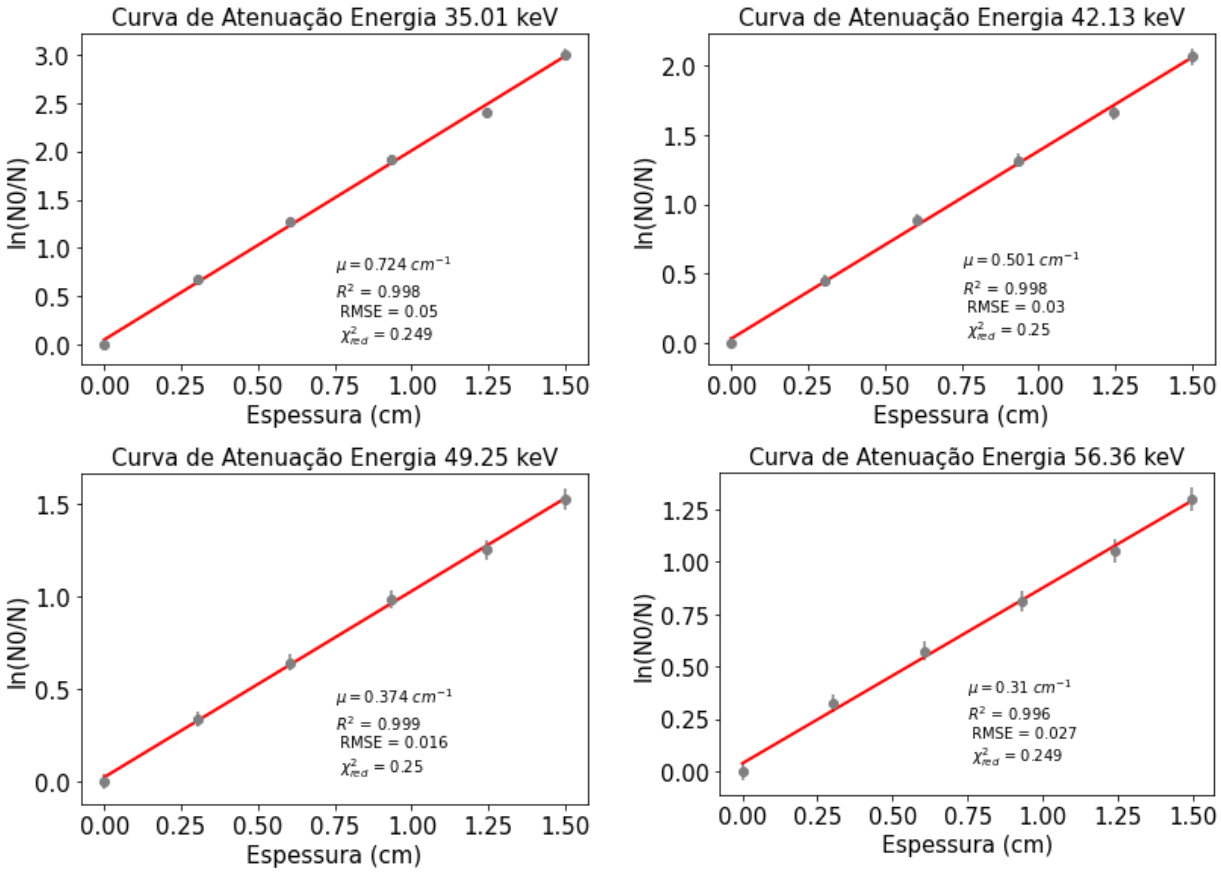
Tabela 8 - Cortes de energia nos espectros usados no programa em Python.

Elemento	**Corte em energia (keV)**
Alumínio	35 a 60
Cobre	30 a 60
Prata	45 a 73
PMMA	20 a 65
Poliéster	20 a 65
Resina Dental	20 a 65

As curvas de atenuação do alumínio são apresentadas na Figura 37, gravadas na pasta “image” citada na subseção 3.5.3.

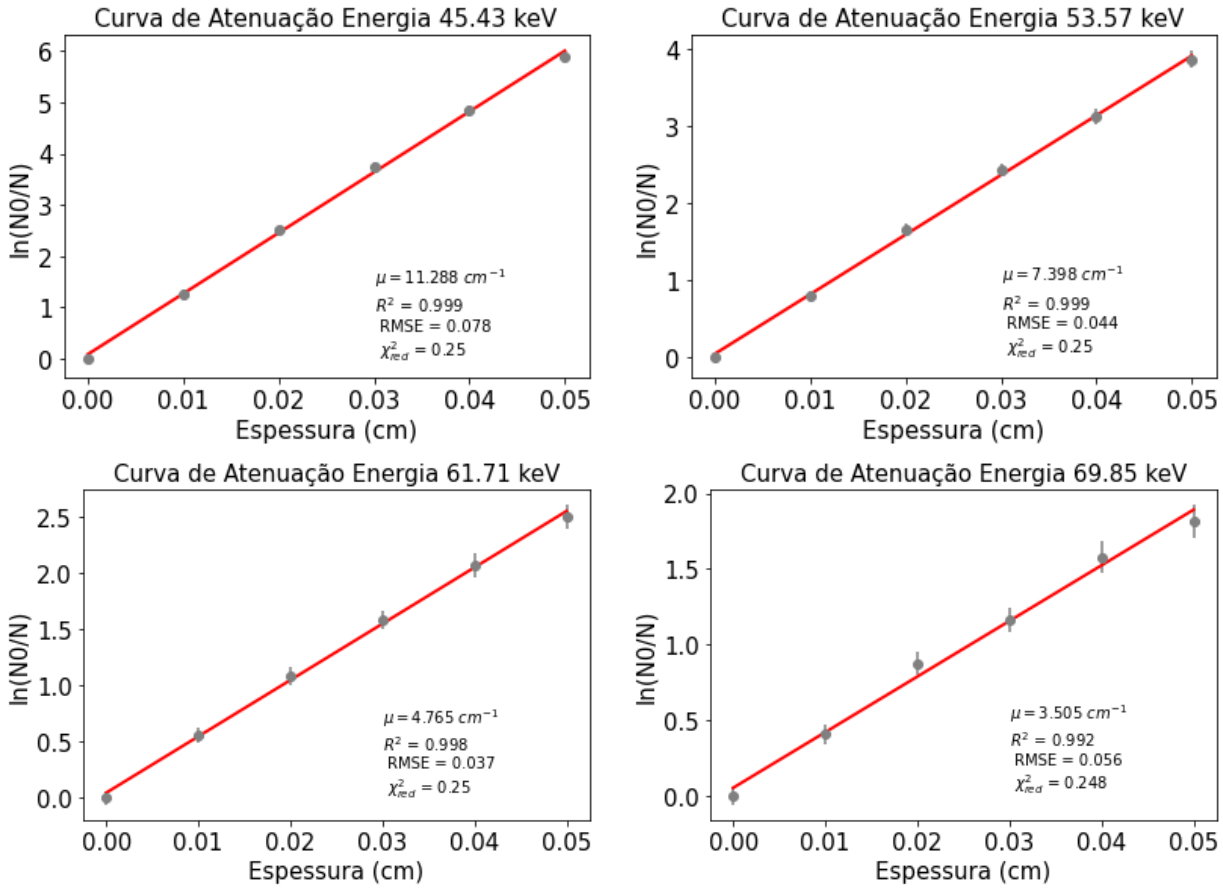
Para o teste do Qui-Quadrado reduzido (χ^2_{red}), fizemos a soma dos valores de χ^2 e dividimos pelo grau de liberdade. Todos os de χ^2_{red} ficaram próximos de 1, sendo assim, os valores de coeficiente mássico de todos os materiais avaliados são considerados consistentes.

Figura 37 - Curvas de atenuação do alumínio pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python.



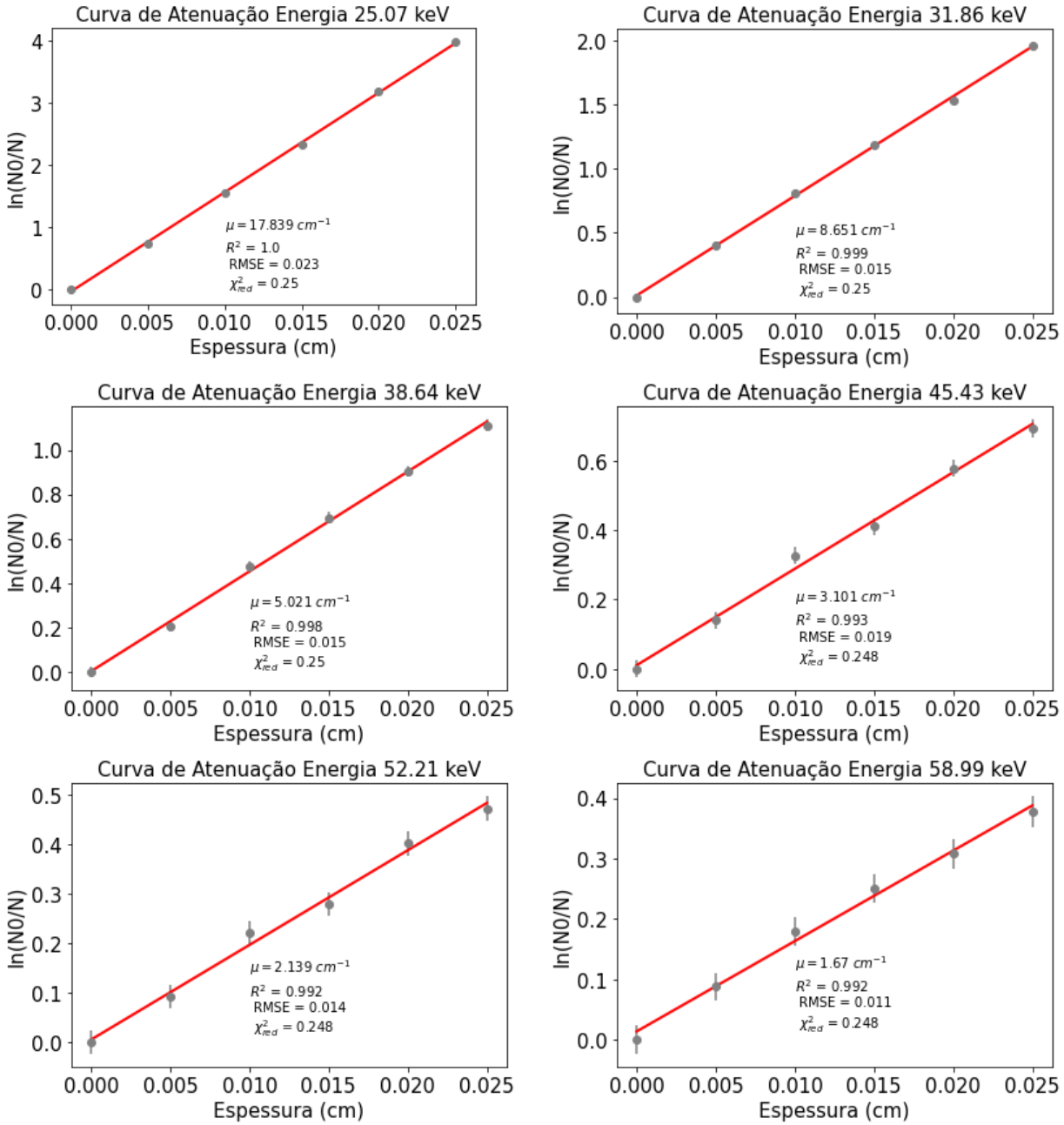
As curvas de atenuação da prata são apresentadas na Figura 38.

Figura 38 - Curvas de atenuação da prata pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python.



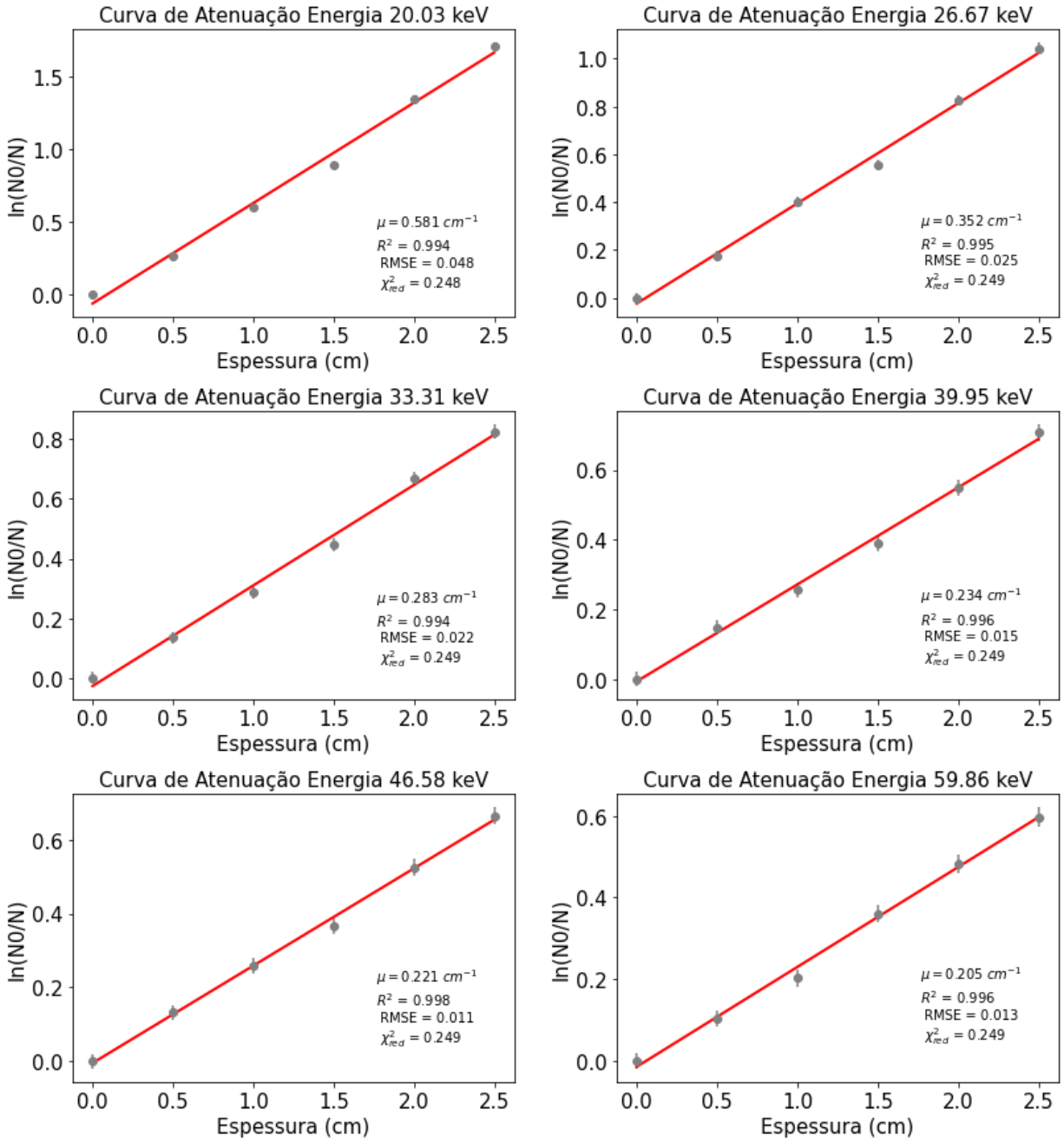
As curvas de atenuação do cobre são apresentadas na Figura 39.

Figura 39 - Curvas de atenuação do cobre pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python.



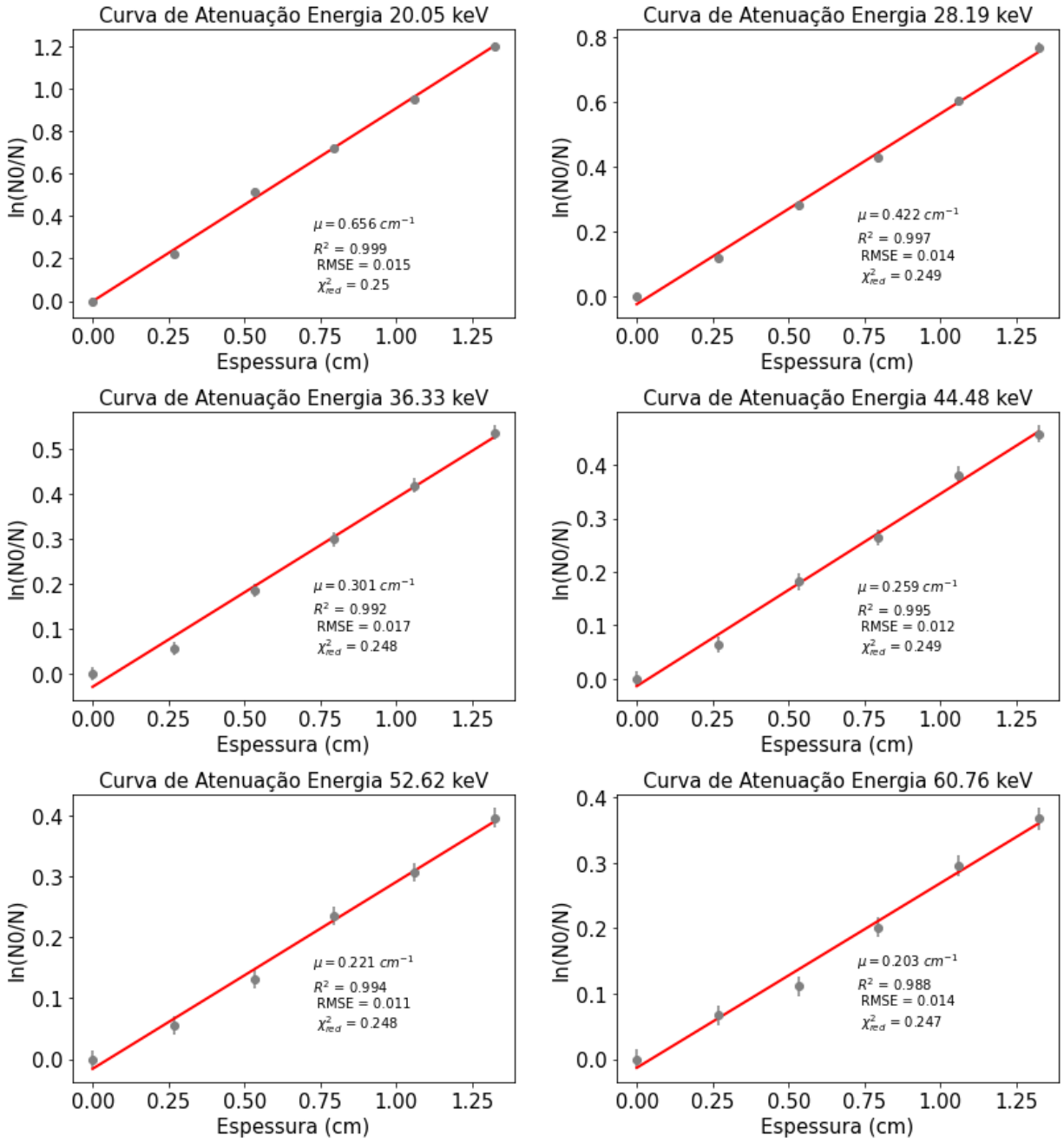
As curvas de atenuação do PMMA são apresentadas na Figura 40.

Figura 40 - Curvas de atenuação do PMMA pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python.



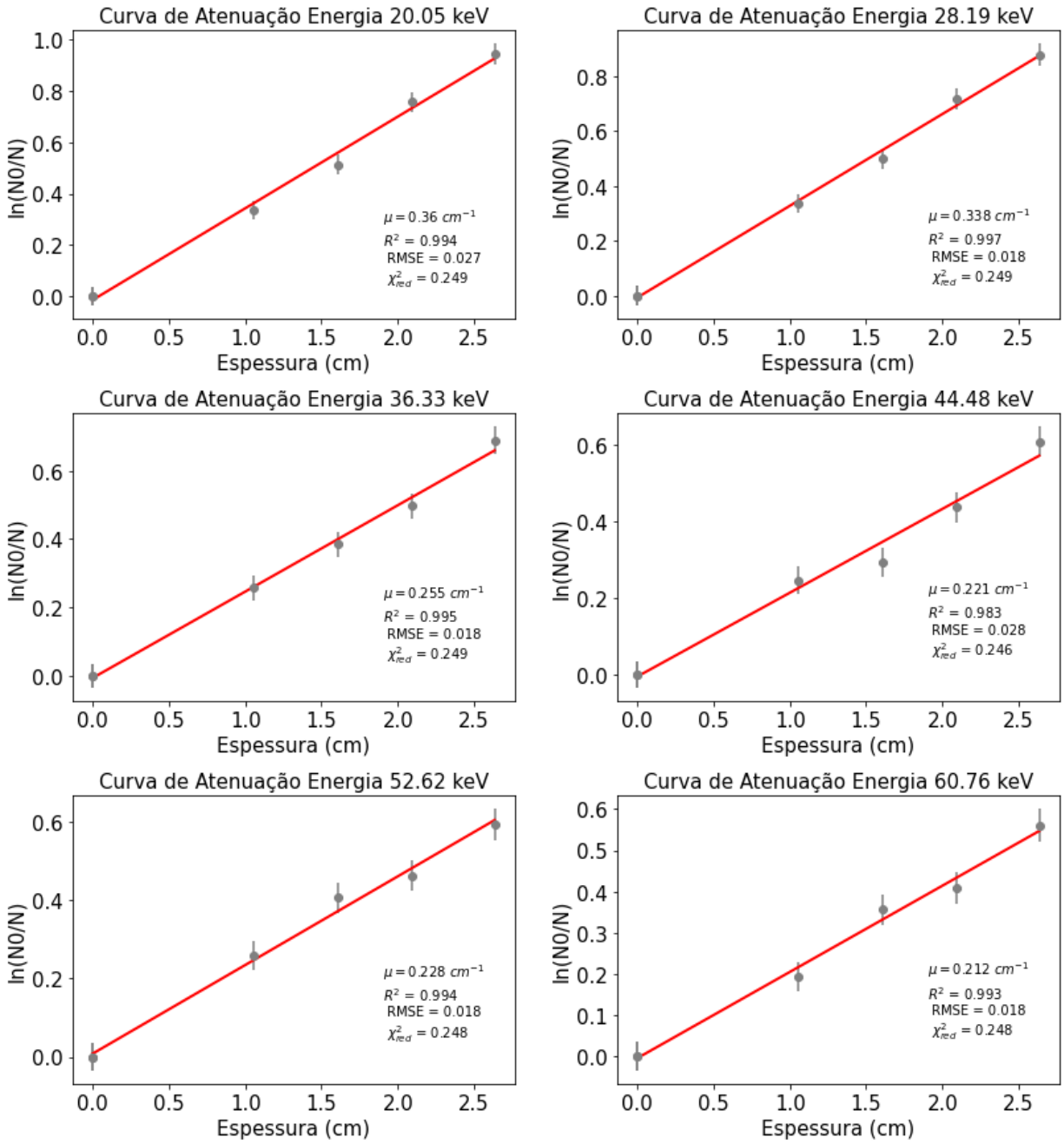
As curvas de atenuação do poliéster são apresentadas na Figura 41.

Figura 41 - Curvas de atenuação do poliéster pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python.



As curvas de atenuação da resina dental são apresentadas na Figura 42.

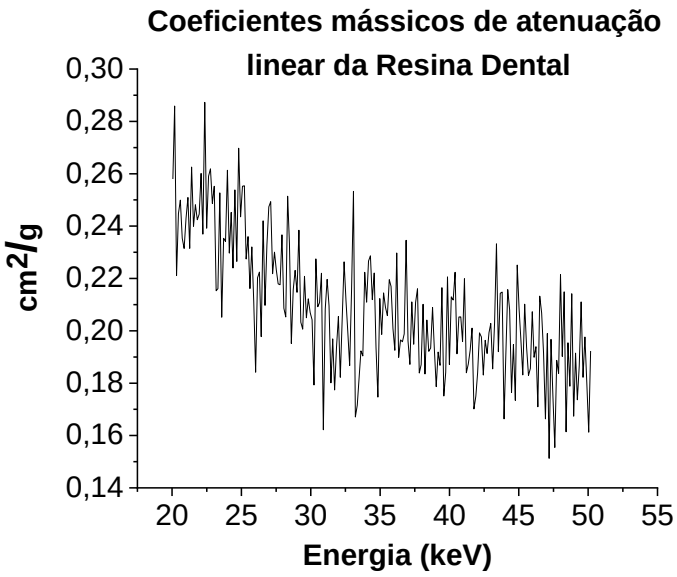
Figura 42 - Curvas de atenuação da resina dental pelo método canal a canal obtidas pelo programa em Python



4.6 INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE CONTAGENS DO ESPECTRO

O curva de coeficientes calculados para a resina dental (Figura 43) grande dispersão nos dados de μ/ρ, sendo uma curva muito ruidosa.

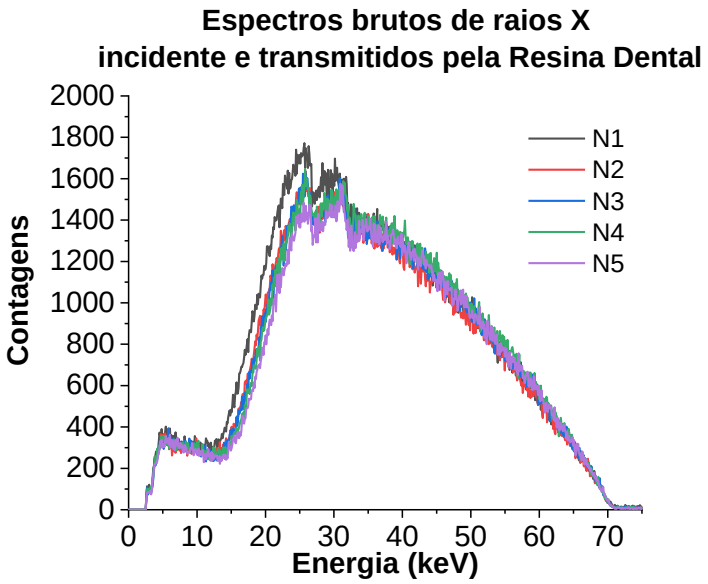
Figura 43 - Gráfico dos coeficientes mássicos de atenuação para a resina dental em função da energia.



Este fato é explicado pelo baixo número de contagens detectadas para este material (Figura 44). Como já foi citado neste trabalho, a resina dental foi o material que apresentou menor número de contagens nos espectros experimentais.

Na Figura 44 observamos que a maior contagem medida no espectro da resina dental foi 1772. Enquanto os outros espectros medidos tiveram mais de 10.000 contagens no maior pico, com exceção do alumínio que a maior contagem ficou em torno de 8.000 contagens.

Figura 44 - Espectro bruto (sem nenhuma correção) medido com a resina dental.



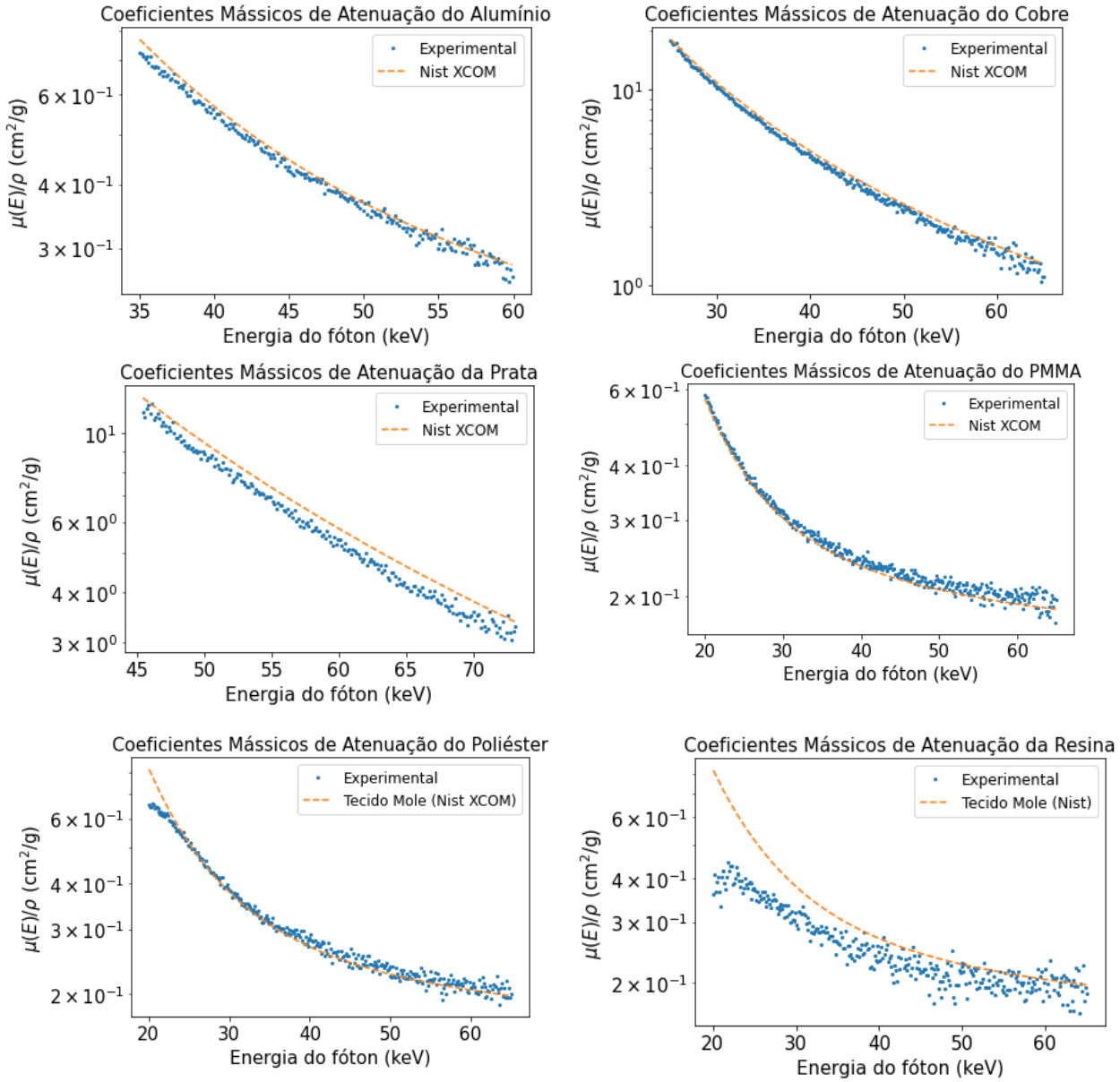
Este resultado não é muito confiável, devido à grande dispersão nos valores. A curva também não é muito adequada para fazer comparação com as curvas de referência. Os espectros foram medidos sem o cuidado de verificar as contagens totais. Embora o resultado não tenha ficado como esperado, esse resultado ilustra a importância no número de contagens totais para o uso desse método.

4.7 GRÁFICOS COMPARATIVOS ENTRE μ/ρ EXPERIMENTAIS E VALORES DO NIST (MÉTODO CANAL A CANAL)

Para a validação da metodologia foi de extrema importância comparar os valores obtidos pelo método proposto e os valores de referência. Essa comparação se fez, inicialmente, por meio de uma análise qualitativa de gráficos que exibem as curvas com ambos os valores de μ/ρ. A Figura 45 mostra todos os gráficos obtidos pelo programa em Python a partir da metodologia canal a canal e os compara com os valores do NIST.

No caso do poliéster e da resina, por não terem seus valores tabelados, comparamos pc valores experimentais com o μ/ρ do tecido mole.

Figura 45 - Gráficos comparativos entre μ/ρ obtidos pelo método proposto e valores do NIST para todos os materiais analisados.



Apenas a Ag e a resina dental possuem pontos visivelmente distantes da curva do NIST.. No caso da prata, a oxidação das folhas pode ter interferido em sua composição etalvez os valores sejam menores devido ao corte de energia escolhido. Além disso, não levamos em conta as incertezas dos valores de coeficientes mássicos do NIST. Já, para a resina dental, os dados estão ruidosos e pobres para uma comparação adequada.

4.8 TESTE DO COEFICIENTE DE CORRELAÇÃO (r) DE PEARSON

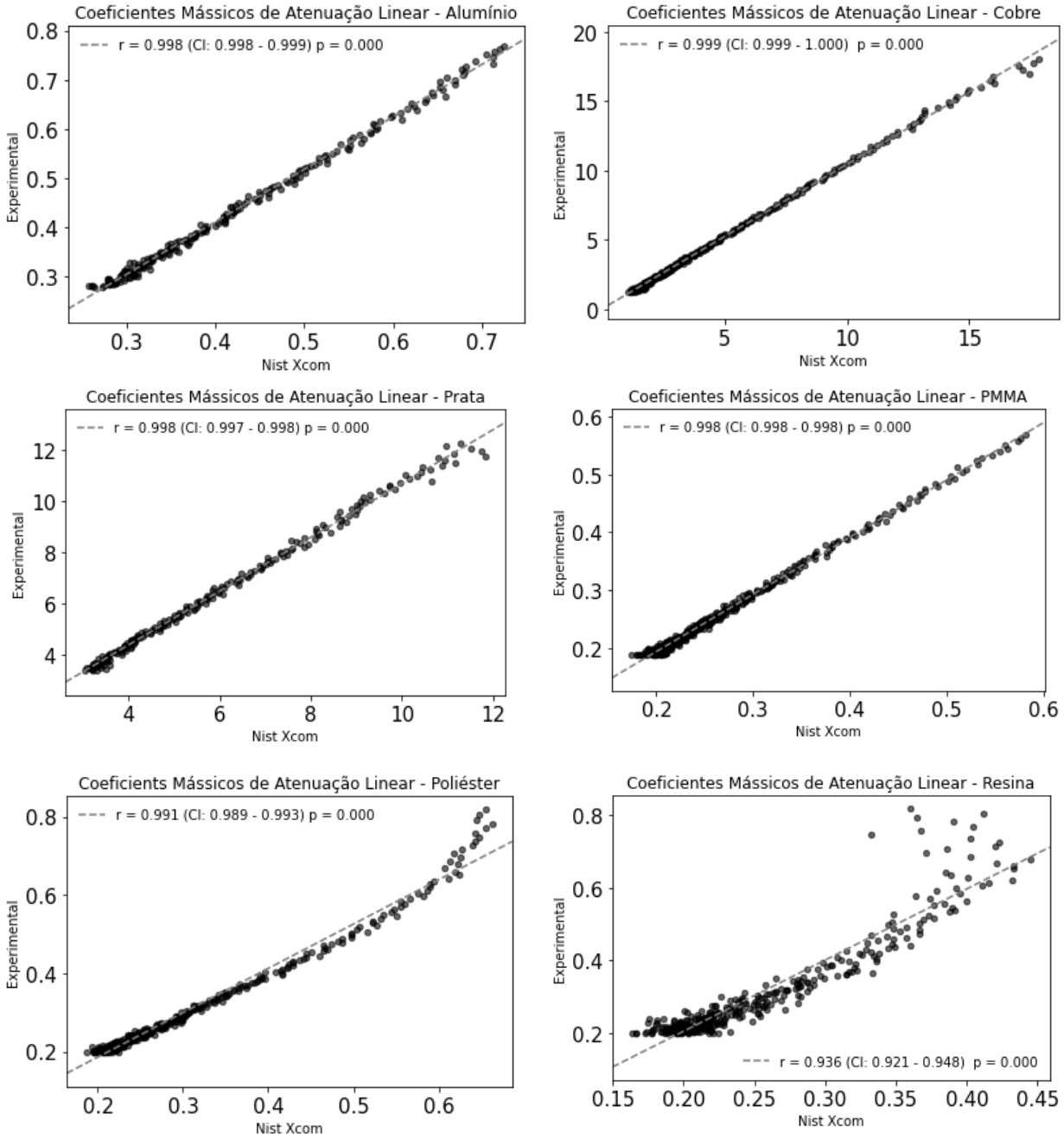
Além da análise qualitativa, optamos por fazer o teste do Coeficiente de Correlação r de Pearson, que foi obtido para todos os materiais (Figura 46). Este gráfico é descrito por Bland e Altman (BLAND; ALTMAN, 1986). Os quatro materiais usados para validação (Al, Cu, Ag e PMMA) mostraram um comportamento linear entre os dados e os pontos experimentais estão próximos da reta de igualdade. Os dados do poliéster e da resina foram novamente comparados com os μ/ρ do tecido mole. O gráfico que apresenta a maior flutuação dos dados em relação a reta de igualdade é o gráfico da resina dental, mostrando mais uma vez o efeito das baixas contagens dos espectros nos resultados.

Podemos então afirmar que as variáveis estão diretamente correlacionadas em todos os materiais, uma vez que todos possuem o valor de coeficiente de correlação próximo de 1 e positivo. Essa afirmação pode ser feita pois todos os coeficientes r possuem seus valores dentro dos seus respectivos intervalos de confiança.

Estes resultados estão condicionados aos cortes de energias da Tabela 8. Esperamos que ao considerar os espectros completos, sem corte nos canais com baixas contagens, os resultados sejam diferentes. No gráfico do poliéster na Figura 46 é possível notar que os pontos começam a se espalhar, perdendo o comportamento linear, para valores de μ/ρ mais altos. Isso pode sugerir que o poliéster pode ser usado como um material substituto do tecido mole apenas dentro de um intervalo de energia.

Observamos que, no teste de correlação de Pearson, a Ag teve bons resultados em desacordo com o gráfico apresentado na Figura 45.

Figura 46 - Gráficos dos coeficientes de correlação r de Pearson para todos os materiais analisados.

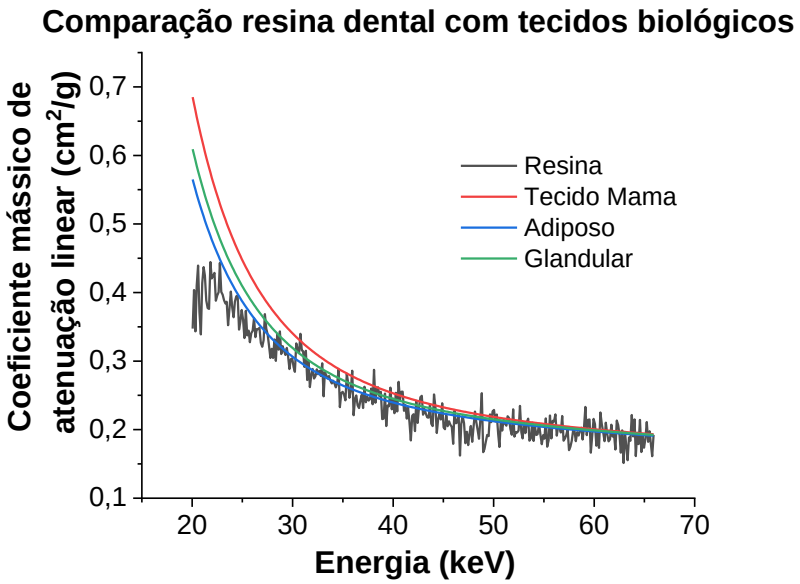


4.9 COMPARAÇÃO ENTRE MATERIAL ESTUDADOS E TECIDOS BIOLÓGICOS

Como dito anteriormente, o PMMA, o poliéster e a resina dental, são usados como materiais tecido-equivalente. Entretanto, o poliéster e a resina dental não possuem seus valores de μ/ρ tabelados no NIST XCOM.

A Figura 47 mostra as curvas com valores de μ/ρ medidos experimentalmente para a resina dental com valores de μ/ρ do tecido mamário, tecido adiposo e tecido glandular tabelados no NIST XCOM.

Figura 47.- Comparação valores de μ/ρ medidos experimentalmente para a resina dental com valores de μ/ρ do tecido mamário, tecido adiposo e tecido glandular tabelados no NIST XCOM.

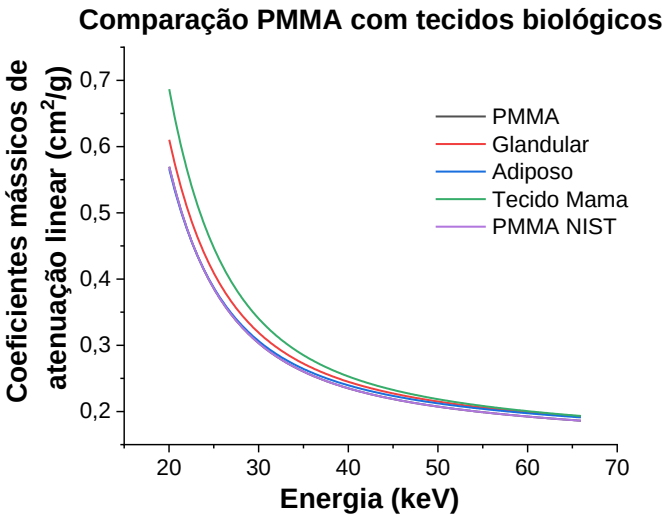


Nota-se que para baixas energias o μ/ρ da resina não se aproxima de nenhum dos tecidos biológicos estudados. A partir de 30 keV, μ/ρ se aproxima do μ/ρ do tecido adiposo e, para energias mais altas, a partir de 50 keV, todas as curvas estão próximas.

No caso do PMMA (Figura 48), os valores medidos experimentalmente concordam com os valores de referência (PMMA NIST) e se aproximam dos valores de μ/ρ do tecido

adiposo. Isso sugere que a composição do material deve considerar mais tecido adiposo do que tecido glandular para simular uma mama.

Figura 48 - Comparação valores de μ/ρ medidos experimentalmente para o PMMA com valores de μ/ρ do tecido mamário, tecido adiposo e tecido glandular tabelados no NIST XCOM.



5. DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

A comparação entre os espectros corrigidos e sem correção mostrou que os espectros corrigidos têm energia média maior que os espectros sem correções. Além disso, encontramos um resultado mais próximo do esperado dos valores de coeficientes mássicos de atenuação quando utilizamos os espectros que foram submetidos a correção pela metodologia *stripping* (DI CASTRO; PANI; PELLEGRINI; BACCI, 1984). Conforme discutido na subseção 4.2, vemos que essa correção remove contagens indevidas tornando os espectros mais adequados para o uso na metodologia canal a canal.

Os dados de coeficientes mássicos de atenuação experimentais pelo método integrado a partir da energia média dos espectros tiveram resultados inconclusivos. Observamos que a energia média dos espectros varia muito para cada espessura de amostra. Acreditamos que o ideal seria filtrar mais o feixe até que a energia média se aproxime da energia efetiva, já que o μ/ρ está associado à energia efetiva pela Equação 2 deste trabalho.

Os espectros de Al e resina dental foram os espectros que obtiveram as menores contagens, ambos foram medidos no LAFRAG. Acreditamos que este fato se deu devido à falta de um alinhamento preciso do feixe com o detector, que no LAFRAG, é feita utilizando controladores mecânicos de movimento e o programa Esp Útil.

As curvas de atenuação extraídas do conjunto das diversas curvas que são criadas ao se analisar a atenuação canal por canal e que nos permitiram obter os valores de μ/ρ, mostraram resultados satisfatórios, com exceção da curva de atenuação do poliéster na energia 60,76 keV e da resina dental na energia 44,48 keV. É esperado que os ajustes lineares reduzam a qualidade à medida que a energia aumenta, uma vez que nos canais de maiores energias há menos contagens detectadas e a incerteza estatística é maior. Isso deve ocorrer por conta das contagens reduzidas na parte final do espectro. Isso se agrava se os espectros são medidos inicialmente com baixas contagens como foi o caso do poliéster.

Com os resultados obtidos com os espectros da resina dental, podemos concluir que é essencial que haja um número mínimo de contagens nos canais para que os dados sejam úteis para serem usados na metodologia canal a canal. Observamos que para a melhor precisão dos valores é necessário medições de espectros com tempos mais longos para maior número de contagens. Isso reduz a incerteza de natureza estatística ou ruido do espectro. Este fato, bem como a dificuldade no alinhamento devido a colimação (feixe estreito), baixa resolução do detector e, consequentemente, superposição de energias, podem ser consideradas uma limitação experimental da metodologia sugerida neste trabalho.

Os gráficos comparativos de μ/ρ experimental e μ/ρ do NIST pelo método canal a canal, mostraram boa concordânciapelos gráficos comparativos. Porém, é necessária uma análise quantitativa para concluir que existe alguma concordância entres esses valores.

Através dos resultados do teste de correlação de Pearson, na subseção 4.7, podemos concluir que, em todos os materiais, os μ/ρ obtidos pela metodologia proposta neste trabalho possuem uma correlação direta com os μ/ρ de referência disponibilizados pelo NIST XCOM.

As comparações dos μ/ρ experimentais do PMMA com outros tecidos biológicos mostrou que o PMMA pode ser melhor utilizado como tecido substituto de tecido adiposo.

Os materiais Al, Cu, Ag e PMMA mostraram boa correlação dos valores de μ/ρ, especialmente o cobre, dessa forma, podemos considerar que a metodologia foi validada e o programa desenvolvido pode ser usado por outros usuários para determinar μ/ρ.

As duas metodologias usadas neste trabalho para determinar os coeficientes mássicos de atenuação apresentaram resultados satisfatórios. Porém, o método canal a canal é mais promissor e se destaca, pois, como o μ/ρ é função da energia, apresenta resultados mais fidedignos. Neste trabalho a metodologia de determinação de coeficientes mássicos de atenuação para cada energia de um espectro obtido com feixe de raios X polienergéticos foi melhor discutida e avaliada.

6. PROJEÇÕES FUTURAS E APLICAÇÕES

Os resultados encontrados pela aplicação desta metodologia podem ser usados em outros projetos como por exemplo a caracterização de outros materiais substitutos de tecido humano.

O programa ainda precisa de ajustes e pretendemos tornar a interface com o usuário (tabela do Excel) o mais simples possível. Além de implementar um teste de correlação interclasse para quantificar a concordância entre os valores de μ/ρ. Como uma projeção futura para melhoria da metodologia canal a canal sugerimos realizar a determinação dos conjuntos de parâmetros experimentais que reduzam a incerteza experimental, como a melhor energia do feixe, o número mínimo de contagens e a melhor espessura de amostra. As outras limitações são mais práticas, por isso desenvolver uma metodologia de alinhamento mais prática e reprodutível e usar um detector com maior resolução deve melhorar os resultados.

7. REFERÊNCIAS

AGARWAL, Bipin K. X-ray spectroscopy: an introduction. Springer, 2013.

ALBUQUERQUE, M. P. P.; CALDAS, L. V. E. Metodo simplificado de determinacao de energia efetiva de feixes de radiacao-X. Revista Brasileira de Engenharia, 1990.

AMPTEK. PX5 DPP, MCA and Power Supply. [Online] Disponível em: https://www.amptek.com/products/digital-pulse-processors/px5-digital-pulse-processor. Acesso em: 13/04/2022.

ATTIX, Frank Herbert. Introduction to radiological physics and radiation dosimetry. John Wiley & Sons, 1996.

AWASARMOL, Vishal V. et al. Photon interaction study of organic nonlinear optical materials in the energy range 122–1330 keV. Radiation Physics and Chemistry, v. 130, p. 343-350, 2017.

BARRAGAN, Carolina Marcela Viloria. Desenvolvimento de algoritmos para avaliação da imagem do Simulador Phantom mama para o controle de qualidade em mamografia. 2016.

BERGER, M. J.; HUBBELL, J. R.; SELTZER, S. M.; CHANG, J. et al. XCOM: Photon Cross Sections Database (version 1.5). [Online] Available: http://physics.nist.gov/xcom [2022, April 13]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD., 2010. Disponível em: http://physics.nist.gov/xcom. Acesso em: 13/04/2022.

BLAND, J. Martin; ALTMAN, Douglas G. Statistical methods for assessing agreement between two methods of clinical measurement. The lancet, v. 327, n. 8476, p. 307-310, 1986.

BUSHBERG, Jerrold T.; BOONE, John M. The essential physics of medical imaging. Lippincott Williams & Wilkins, 2011.

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR. CNEN NN 3.01 – DIRETRIZES BÁSICAS DE PROTEÇÃO RADIOLÓGICA. 2014.

CORRÊA, Eduardo de L. et al. Comparação de espectros de raios X gerados por um alvo de W e filtração adicional de Mo e Al para aplicações em metrologia na mamografia. Repositório do IPEN, 2009. [Online] Disponível em: http://repositorio.ipen.br/handle/123456789/13124. Acesso em: 13/04/2022.

DI CASTRO, E. et al. The use of cadmium telluride detectors for the qualitative analysis of diagnostic x-ray spectra. Physics in Medicine & Biology, v. 29, n. 9, p. 1117, 1984.

DO NASCIMENTO, M. R.; SANTOS, J. C.; MACEDO , E. M.; PACÍFICO, L. D. C. et al. The Stripping Method for X-Ray Spectral Correction at Diagnostic Energy Range. Congresso de Metrologia 2021. [Online] Disponível em: https://metrologia2021.org.br/?p=1975. Acesso em: 13/04/2022.

FREIRE, S. M. Bioestatística Básica. Universidade do Estado do Rio de Janeiro 2021. [Online] Disponível em: http://www.lampada.uerj.br/arquivosdb/_book/bioestatisticaBasica.html. Acesso em: 13/04/2022.

FRIMAIO, Audrew et al. X-ray spectrometry applied for determination of linear attenuation coefficient of tissue-equivalent materials. Radiation Physics and Chemistry, v. 160, p. 89-95, 2019.

GOLDSTONE, K. E. Tissue Substitutes in Radiation Dosimetry and Measurement, in: ICRU Report 44, International Commission on Radiation Units and Measurements, USA (1989). 1990.

JACKSON, Daphne F.; HAWKES, David J. X-ray attenuation coefficients of elements and mixtures. Physics Reports, v. 70, n. 3, p. 169-233, 1981.

JAIYEN, Sarawut; PHUNPUEOK, Akapong; THONGPOOL, Voranuch. Determination of radiation attenuation coefficients of BaSO4/PVC and BaSO4/PS for X-ray shielding. In: Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing, 2019. p. 012133.

KIRZ, J.; ATTWOOD, D. T.; HENKE, B. L.; HOWELLS, M. R. et al. X-ray Data Booklet. Lawrence Berkeley National Laboratory. 2009. [Online] Disponível em: https://xdb.lbl.gov/xdb.pdf. Acesso em: 13/04/2022.

KIUSALAAS, J. Numerical Methods in Engineering with Python 3 (3rd ed.). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9781139523899. 2013.

KNOLL, Glenn F. Radiation detection and measurement. John Wiley & Sons, 2010.

MANJUNATHA, H. C. et al. A study of X-ray, gamma and neutron shielding parameters in Si-alloys. Radiation Physics and Chemistry, v. 165, p. 108414, 2019.

MOUSA, Almahdi; KUSMINARTO, Kus; SUPARTA, Gede Bayu. A new simple method to measure the X-ray linear attenuation coefficients of materials using micro-digital radiography machine. International Journal of Applied Engineering Research, v. 12, n. 21, p. 10589-10594, 2017.

OBAID, Shamsan S.; GAIKWAD, Dhammajyot K.; PAWAR, Pravina P. Determination of gamma ray shielding parameters of rocks and concrete. Radiation physics and chemistry, v. 144, p. 356-360, 2018.

OKUNO, E.; YOSHIMURA, E. M. Física das radiações. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.

PEREIRA, Dirceu Dias et al. Validation of polylactic acid polymer as soft tissue substitutive in radiotherapy. Radiation Physics and Chemistry, v. 189, p. 109726, 2021.

PODGORSAK, Ervin B. et al. Radiation oncology physics. Vienna: IAEA, 2005.

HUQ, M. Saiful et al. The report of Task Group 100 of the AAPM: Application of risk analysis methods to radiation therapy quality management. Medical physics, v. 43, n. 7, p. 4209-4262, 2016.

SANTOS, Josilene Cerqueira. Estudo experimental das relações entre Kerma no ar e equivalente de dose ambiente para o cálculo de barreiras primárias em salas radiológicas. 2013. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. doi:10.11606/D.43.2013.tde-26032014-113306. Acesso em: 2022-04-13.

SANTOS, Josilene Cerqueira. Determinação experimental da distribuição de dose absorvida em diferentes qualidades de feixes mamográficos. 2017. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. doi:10.11606/T.43.2018.tde-26042018-121103. Acesso em: 2022-04-13.

SANTOS, J. C. et al. Characterization and applicability of low-density materials for making 3D physical anthropomorphic breast phantoms. Radiation Physics and Chemistry, v. 164, p. 108361, 2019.

SANTOS, J. C.; ALMEIDA, C. D.; IWAHARA, A.; PEIXOTO, J. E. X-ray spectrometry for the characterization and selection of breast tissue-equivalent materials for making 3D anthropomorphic phantoms. Proceedings of the 24 Brazilian congress on medical physics, (p. 567). Brazil, 2019.

SIRICO, A.C.A., Costa, P.R., & Frimaio, A. Measurement of the Linear Attenuation Coefficient of Resin-Based Water-Equivalent Materials (IAEA-CN--279). International Atomic Energy Agency (IAEA). 2021.

TOMAL, Alessandra et al. Monte Carlo simulation of the response functions of CdTe detectors to be applied in x-ray spectroscopy. Applied Radiation and Isotopes, v. 100, p. 32-37, 2015.

VAN GRIEKEN, Rene; MARKOWICZ, Andrzej. Handbook of X-ray Spectrometry. CRC press, 2001.

VILLANI, D.; RODRIGUES JR, O.; CAMPOS, L. L. Dosimetric characterization of 3D printed phantoms at different infill percentages for diagnostic X-ray energy range. Radiation Physics and Chemistry, v. 172, p. 108728, 2020.

H. D. Young & R. A. Freedman, "Física III: Eletromagnetismo, 12a. ed." Pearson, São Paulo, Brasil, 2009.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Captura de tela de parte da planilha de Excel com os dados de entrada para o programa em Python inseridos pelo usuário, dentre os quais estão as espessuras de material atenuador em centímetros, o número de canais do espectro, os coeficientes da reta de calibração, o valor de mAs usado para cada espessura e as contagens em cada espectro.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	X (cm)	Canais	b	a	mAs			KeV	MEV	N0	N1	N2	N3	N4	N5
2	0.00	1	-0.21216	0.11063	137.24			5.09808	0.00509808	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	0.50	2			162.32			5.20871	0.00520871	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	1.00	3			164.42			5.31934	0.00531934	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1.50	4			189.62			5.42997	0.00542997	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	2.00	5			215.58			5.5406	0.0055406	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	2.50	6			241.1			5.65123	0.00565123	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8		7						5.76186	0.00576186	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9		8						5.87249	0.00587249	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10		9						5.98312	0.00598312	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11		10						6.09375	0.00609375	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12		11						6.20438	0.00620438	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13		12						6.31501	0.00631501	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14		13						6.42564	0.00642564	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15		14						6.53627	0.00653627	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16		15						6.6469	0.0066469	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17		16						6.75753	0.00675753	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18		17						6.86816	0.00686816	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19		18						6.97879	0.00697879	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20		19						7.08942	0.00708942	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21		20						7.20005	0.00720005	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
22		21						7.31068	0.00731068	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
23		22						7.42131	0.00742131	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24		23						7.53194	0.00753194	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25		24						7.64257	0.00764257	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

APÊNDICE B – Código desenvolvido em Python para determinação de coeficientes mássicos de atenuação.

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  2 17:49:27 2022

@author: juli2
"""

# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Spyder Editor

This is a temporary script file.
"""
# from numpy import *
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.pyplot import *
import scipy as sp
from scipy import interpolate
import pandas as pd
```

```
from scipy.optimize import curve_fit

from scipy.optimize import differential_evolution

import warnings

from openpyxl import load_workbook

import time

from numba import jit

import seaborn as seabornInstance

from sklearn.model_selection import train_test_split

from sklearn.linear_model import LinearRegression

from sklearn import metrics

import random

import scipy.stats as stats


#_____________________________________________________


from IPython import get_ipython;   # clear all

get_ipython().magic('reset -sf')


close('all')


warnings.filterwarnings("ignore")


Inicio=time.time()

#_____________________________________________
```

```
##DADOS

        ## DENSIDADE DO ELMATERIAL


densidade =   #g/cm^3 ## preencher densidade do material




       ## CURVA E MI/RHO DE REFERÊNCIA (NIST XCOM)


dados_Ref = np.loadtxt('mi_.txt')    ##  deve adequar ao seu elemento

mi_Ref = dados_Ref[:,1]

E_Ref = dados_Ref[:,0]


#_____________________________________________________________________
__


## DADOS EXPERIMENTAIS


tabela=np.array(pd.read_excel('dados_.xlsx'))

for i in range(len(tabela)):

    for j in range(len(tabela[0])):

        if np.isnan(tabela[i,j]):

            tabela[i,j]=0

Dados = tabela[:,34:]
```

```
# ENERGIA EXPERIMENTAL CORTADA E SEM NaN

E0 = tabela[:,33]


E = []


for i in range(len(E0)): # nesse laço, guarda em N somente os valores
diferentes de zero.

    if E0[i]!=0:

        E.append(E0[i])

E0 = np.array(E)


# ESPECTROS CORTADOS E SEM NaN


Dados1 =[]    ## espesctros cortados sem zeros e NaNs


for i in range(len(Dados)): # nesse laço, guarda em N somente os valores
diferentes de zero.

    if Dados[i,0]!=0:

        Dados1.append(Dados[i])

Dados = np.array(Dados1)   ## espesctros cortados sem zeros e NaNs


# SEPARANDO OS ESPECTROS CORTADOS E ESPESSURAS DE AMOSTRA


X = tabela[0:6,0]   ## ESPESSURA EM CM

X = X.reshape(-1, 1)
```

```
# E=Dados[:,0]

N0=Dados[:,0]

N1=Dados[:,1]

N2=Dados[:,2]

N3=Dados[:,3]

N4=Dados[:,4]

N5=Dados[:,5]



## TABELA DE ln(N0/N)



y0 = np.log(N0/N0)


y1 = np.log(N0/N1)


y2 = np.log(N0/N2)


y3 = np.log(N0/N3)


y4 = np.log(N0/N4)


y5 = np.log(N0/N5)


y = np.array([y0, y1, y2, y3, y4, y5])
```

```
## INCERTEZAS DE ln(N0/N)

i0 = (N0/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N0**3))+(N0/(N0**2)))

i1 = (N1/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N1**3))+(N0/(N1**2)))

i2 = (N2/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N2**3))+(N0/(N2**2)))

i3 = (N3/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N3**3))+(N0/(N3**2)))

i4 = (N4/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N4**3))+(N0/(N4**2)))

i5 = (N5/N0)*np.sqrt(((N0**2)/(N5**3))+(N0/(N5**2)))

Iinc = np.array([i0, i1, i2, i3, i4, i5])


### AJUSTE LINEAR

Dimension = len(y.T) #valor inteiro que servira para pre-alocar memoria e
acelerar código.
```

```
r2_score = np.empty(Dimension)#[]                    # QUI-QUADRADO


R2 = np.empty(Dimension)#[]                     # QUI-QUADRADO


mi_rho = np.empty(Dimension)#[]                # COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO
MASSICO


RMSE1 = np.empty(Dimension)#[]                      # VALORES DE RSME NO
AJUSTE


quireduzido = np.empty(Dimension)#[]



for i in range(len(Iinc.T)):

    Yinc = Iinc[:,i]


y_err = Yinc                       # Erro em Y


Yarm=np.empty((len(y.T),len(y[:,0])))


y_reg = np.empty((len(y.T),len(X)))



for i in range(len(y.T)):

    Y = y[:,i]

    regressor = LinearRegression()
```

```
regressor.fit(X, Y) #training the algorithm
y_reg[i] = regressor.predict(X)

e = (E[i])                                  #ENERGIA PARA PLOT
Yarm[i] = Y



## ESTATÍSTICAS
squaredDiffs = np.square(Y - y_reg[i])
squaredDiffsFromMean = np.square(Y - np.mean(y_reg[i]))
rSquared = 1 - np.sum(squaredDiffs) / np.sum(squaredDiffsFromMean)
R2[i]=(rSquared)

## MÉTRICAS DO AJUSTE LINEAR
MAE = metrics.mean_absolute_error(Y, y_reg[i])
MSE = metrics.mean_squared_error(Y, y_reg[i])
RMSE = np.sqrt(metrics.mean_squared_error(Y, y_reg[i]))
RMSE1 [i] = RMSE

## QUI QUADRADO
# sum of square of residuals
ssr = np.sum((y_reg[i] - Y)**2)
#  total sum of squares
sst = np.sum((Y - np.mean(Y))**2)
# R2 score
```

```
    r2_score[i] = 1 - (ssr/sst)

    quireduzido[i] = r2_score[i]/4



    ## COEFICIENTE MÁSSICO DE ATENUAÇÃO

    mi_rho[i]=(regressor.coef_/densidade)





    ###### GRÁFICOS ######


#@jit

def plotador(h,y_r=y_reg,XX=X,YY=Yarm):

    cs=3

    #h é um espaçador entre imagens, se h=1, imprime todas

    for i in range(0,len(YY),h):

        Y=YY[i]

        X=np.copy(XX)

        # plt.clf()

        plt.figure()

        # plt.scatter(XX, YY[i],  color='gray')

        plt.errorbar(XX, YY[i], yerr=Yinc,color='gray', fmt="o")

        plt.plot(X, y_r[i], color='red', linewidth=2,label='Linear')

        # plt.errorbar(X, Y, yerr = y_err, uplims = up, lolims = lol, fmt
= '.k')
```

```
        #plt.yscale("log")

        plt.title(f'Curva de Atenuação Energia {E[i]*1e3:.2f} keV',
fontsize=15)

        xlabel('Espessura (cm)', fontsize=15, ha='center')

        ylabel(r'ln(N0/N)', fontsize=15,ha='center')

        plt.annotate(f'$\mu = {round(mi_rho[i],cs):}$ '+r'$cm^{-
1}$'+'\n'+r'$R^2$ '+f'= {round(r2_score[i],cs):}\n RMSE =
{round(RMSE1[i],cs)} \n'+r' $\chi^2_{red}$'+f' =
{round(quireduzido[i],cs)}', (XX[-1]-0.75, 0.05), textcoords='offset
pixels')# Quireduzido


plt.savefig(f'image\Curva_de_atenuacao_E{i}',bbox_inches='tight')




plotador(60)




################### COMPARAÇÃO ##################


## EXPERIMENTAL VS NIST

plt.figure()

Ekev = E0*1000

E_Refkev = E_Ref*1000

plt1 = plt.plot(Ekev, mi_rho,'o', markersize=2 )

plt2 = plt.plot(E_Refkev, mi_Ref, '--', markersize=2)

plt.yscale("log")

plt.rcParams['xtick.labelsize'] = 15
```

```
plt.rcParams['ytick.labelsize'] = 15
plt.title(f'Coeficientes Mássicos de Atenuação do Alumínio', fontsize=15)
xlabel('Energia do fóton (keV)', fontsize=15, ha='center')
ylabel(r'$\mu(E)/\rho$ (cm$^{2}$/g)', fontsize=15,ha='center')
plt.gca().legend(('Experimental','Nist XCOM'), fontsize=12)
plt.savefig(f'mi\Comparacao',bbox_inches='tight')
print('Tempo rodando foi de ',time.time()-Inicio)



################### TESTES ESTATÍSTICOS DE CORRELAÇÃO ###########

##### BLAND ALTMAN PRIMEIRO METODO



import statsmodels.api as sm
import matplotlib.pyplot as plt

#create Bland-Altman plot
f, ax = plt.subplots(1, figsize = (8,5))
sm.graphics.mean_diff_plot(mi_rho, mi_Ref, ax = ax)

#display Bland-Altman plot
ax.set(title='Bland-Altman Plot for Two Methods of Measuring',
    xlabel='Média', ylabel='Diferença')
ax.axhline(y=0, c='red', lw=0.5)
```

```
plt.show()



#Visualização dos dados


                    #### r Pearson


r, p = stats.pearsonr(mi_rho, mi_Ref)


# Transform the correlation coefficient into a Fishers' Z-score
r_z = np.arctanh(r)  # These two ways are equivalent
r_z = 0.5 * np.log((1 + r) / (1 - r))  # These two ways are equivalent
# Standard error
se = 1 / np.sqrt(mi_rho.size - 3)
# Calculate confidence interval in Z-space
alpha = 0.05  # 95% CI
z = stats.norm.ppf(1 - alpha / 2)
lo_z, hi_z = r_z - z * se, r_z + z * se
# Transform back into r-space
lo, hi = np.tanh((lo_z, hi_z))
print(f'r = {r:5.3f} (CI: {lo:5.3f} - {hi:5.3f}), p = {p:5.3f}')



# Gradient of line of best-fit
m = r * np.std(mi_Ref) / np.std(mi_rho)
```

```
# Y-intercept of line of best-fit

c = np.mean(mi_Ref) - m * np.mean(mi_rho)


# Plot

ax = plt.axes()

ax.set(title='Coeficientes Mássicos de Atenuação Linear - Alumínio',
ylabel='Experimental', xlabel='Nist Xcom')

# Scatter plot

ax.scatter(mi_rho, mi_Ref, c='k', s=20, alpha=0.6, marker='o')

# Get axis limits

left, right = plt.xlim()

# Keep current axis limits

ax.set_xlim(left, right)

# Line of best-fit

x = np.array([left, right])

y = m * x + c



# Pearson product-moment correlation coefficients

cor = np.corrcoef(mi_rho, mi_Ref)[0][1]

# Mean

mean_true = np.mean(mi_rho)

mean_pred = np.mean(mi_Ref)

# Variance

var_true = np.var(mi_rho)
```

```
var_pred = np.var(mi_Ref)

# Standard deviation

sd_true = np.std(mi_rho)

sd_pred = np.std(mi_Ref)

# Calculate CCC

numerator = 2 * cor * sd_true * sd_pred

denominator = var_true + var_pred + (mean_true - mean_pred)**2

ccc = numerator / denominator



ax.plot(

    x, y, c='grey', ls='--',

    label=f'r = {r:5.3f} (CI: {lo:5.3f} - {hi:5.3f}) p = {p:.3f}'

)

# Legend

ax.legend(frameon=False)

# Show

plt.show()


Results = pd.DataFrame({'E':E,'mi-rho': mi_rho})

writer=pd.ExcelWriter('Output.xlsx', engine='xlsxwriter')

Results.to_excel(writer, sheet_name='Sheet1')

writer.save()
```