UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA
BACHARELADO EM FÍSICA MÉDICA

RUY DA SILVA RAYOL NETO

SIMULAÇÕES DE EXPERIMENTOS DIDÁTICOS EM FÍSICA MÉDICA COM O CÓDIGO COMPUTACIONAL TOPAS MC

RIO DE JANEIRO

2023

RUY DA SILVA RAYOL NETO

SIMULAÇÕES DE EXPERIMENTOS DIDÁTICOS EM FÍSICA MÉDICA COM O CÓDIGO COMPUTACIONAL TOPAS MC

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.

Orientadora:
Profª. Dra. Simone Coutinho Cardoso

Coorientador:
Prof. Dr. Luiz Antonio Ribeiro da Rosa

RIO DE JANEIRO

2023

CIP - Catalogação na Publicação

N469s

Neto, Ruy da Silva Rayol
Simulações de experimentos didáticos em física médica com o código computacional TOPAS MC / Ruy da Silva Rayol Neto. -- Rio de Janeiro, 2023.
57 f.

Orientadora: Simone Coutinho Cardoso.
Coorientador: Luiz Antonio Ribeiro da Rosa.
Trabalho de conclusão de curso (graduação) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Bacharel em Física Médica, 2023.

1. Física das radiações. 2. Monte Carlo. 3. ensino de física. 4. TOPAS MC. 5. Física Médica. I. Cardoso, Simone Coutinho, orient. II. da Rosa, Luiz Antonio Ribeiro, coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os dados fornecidos pelo(a) autor(a), sob a responsabilidade de Miguel Romeu Amorim Neto - CRB-7/6283.

RUY DA SILVA RAYOL NETO

SIMULAÇÕES DE EXPERIMENTOS DIDÁTICOS EM FÍSICA MÉDICA COM O CÓDIGO COMPUTACIONAL TOPAS MC

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.

Aprovada em janeiro de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Drª Simone Coutinho Cardoso - IF/UFRJ (orientadora)

Dr. Lucas Paixão Reis - UFMG

Dr. Alessandro Facure Neves de Salles Soares - CNEN

Rio de Janeiro

2023

Dedico este trabalho aos estudantes e profissionais
de Física Médica que veem a mesma beleza em
Física das Radiações que eu vejo.

Agradecimentos

Aos meus pais, Neyla e Ruy Rayol, por sempre acreditarem no meu potencial, por me apoiarem incondicionalmente na minha trajetória acadêmica, e, principalmente, por me ensinarem a correr atrás dos meus sonhos. Vocês foram - e são - essenciais e os amo.

À professora e orientadora Simone Coutinho Cardoso por me acompanhar na graduação desde a inscrição de disciplinas no primeiro período e por me mostrar os caminhos a serem seguidos na Física Médica e pela confiança depositada.

Ao professor Luiz Antônio Ribeiro da Rosa pelas inúmeras aulas e discussões de física da radioterapia que foram essenciais para acender mais ainda minha vontade de seguir a área.

Ao professor Odair Dias Gonçalves (in memoriam) por me instigar a questionar sempre e por sempre me incentivar a seguir na área de pesquisa da Física das Radiações.

Aos ótimos profissionais que se disponibilizaram a me ensinar Física Médica na prática, contribuindo ao meu crescimento pessoal e profissional. Especialmente Mardey Santana, Bruna Lamis, Nadeem Tahir, João Henrique Castelo, Danilo Copetti, Juan Valani e Miguel Nunes.

Aos meus queridos amigos de longa data, Vitor Almeida de Souza, Pedro Mazone, João Victor Sigaud, Mariana Martins, Henrique Rocha e Marco Menezes, por me mostrarem o que há de melhor na vida.

Aos meus queridos colegas e amigos recentes que a UFRJ me apresentou. Especialmente Carolina Niklaus, Gabriel Miranda, André Luis Fidelis, Larissa Gabriela, Felipe Marques, Tude Braga, Jennifer Müller, Wesley Ramos, Davi Dallapicola e Natália Freitas Fernandez. Agradeço pelo apoio durante toda a graduação e pelas incontáveis chamadas de vídeo durante a pandemia que auxiliaram a me manter são.

Ao grupo de pesquisa do Laboratório da Radiação Gama e X (LAFRAG) que foi essencial para realização deste trabalho.

À equipe da Escola de Música Guitarra Virtual, por me apresentarem a música como válvula de escape necessária durante a produção deste trabalho.

Resumo

O ensino de Física Médica evolui a cada ano no Brasil. A necessidade de métodos didáticos e interativos cresce de maneira proporcional visando uma maior motivação e melhor aprendizagem por parte dos alunos. Nos cursos de graduação em Física Médica no Brasil, a disciplina de Física das Radiações é fundamental para a formação pro ssional do estudante. O objetivo deste trabalho é utilizar o código de Monte Carlo TOPAS MC para simular experimentos que possibilitem a discussão de conteúdos abordados na disciplina de Física das Radiações. A ferramenta poderá ser utilizada por docentes ao ministrar essa disciplina e por alunos que queiram aprofundar seus conhecimentos e serem introduzidos ao método de Monte Carlo. Inicialmente, foi realizada a validação do TOPAS MC para os espectros de fótons utilizados através da comparação com dados da literatura. Com isso, foi possível elaborar os arquivos de entrada e realizar a análise de dados dos arquivos de saída para diferentes con gurações de irradiação abordadas academicamente de modo a evidenciar a in uência de fatores como: estatística das curvas pelo número de histórias; tamanho do campo de irradiação; meios homogêneos e heterogêneos; feixes incidentes de diferentes naturezas. Os resultados obtidos mostram que as simulações elaboradas possibilitam uma análise correta e dinâmica dos processos de interação da radiação com a matéria abordados em Física das Radiações.

Palavras-chave : Física das radiações, Monte Carlo, ensino de física, TOPAS MC, Física Médica.

Abstract

The teaching of medical physics evolves every year in Brazil. The need for didactic and interactive methods grows proportionally, aiming at greater motivation and better learning on the students' behalf. In undergraduate courses in medical physics in Brazil, the discipline of radiation physics is fundamental for the student's professional formation. The purpose of this work is to utilize the TOPAS Monte Carlo to simulate experiments that allow the discussion over covered contents on the discipline of radiation physics related to medical physics. The tool may be used by teachers to minister this discipline and by students that may want to deepen their knowledge and be introduced to the Monte Carlo method. Initially, it was done the code validation for the photon spectra used through the comparison with literature. Therefore, it was possible to elaborate the input archives and perform the output archives data analysis for di erent irradiation setups covered by the academic community in order to evince factors in uence, such as: curves statistics by the number of histories; irradiation eld size; homogeneous and heterogeneous medium; di erent incident beams natures. The obtained results show that the performed simulations allow a correct and dynamic analysis of the radiation interaction processes with matter approached in radiation physics.

Keywords : Radiation physics, Monte Carlo, teaching physics, TOPAS MC, Medical Physics.

Lista de Figuras

1 Seções de choque para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, produção de pares e tripletos em carbono. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999). 16

2 Importância relativa dos três principais tipos de interações de fótons. Figura traduzida e adaptada de Andreo et al. (2017). 17

3 Ilustração do efeito fotoelétrico. 18

4 Seções de choque do efeito fotoelétrico para ou $Z_0 = (79)$. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999). 19

5 Ilustração do espalhamento Compton. 20

6 Seções de choque do efeito Compton para ou $Z_0 = (79)$. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999). 21

7 Ilustração da produção de pares. 22

8 Seções de choque de produção de pares para ou $Z_0 = (79)$. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999). 23

9 Ilustração da produção de tripletos. 23

10 Seções de choque de produção de tripletos para ou $Z_0 = (79)$. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999). 24

11 Esquema de irradiação de feixe estreito. Figura traduzida e adaptada de Bushberg et al. (2012). 25

12 Diagrama simpli cado das principais interações de partículas carregadas com o átomo, dependendo do parâmetro de impacto b relativo ao raio atômico r_a. Colisão inelástica dura (a) e suave (b), para $b \quad r_a$ e $b \quad r_a$, respectivamente, e colisão inelástica radiativa (c) e elástica (d), para $b \quad r_a$ (SOUZA, 2022) 26

13 Esquema de irradiação para obter PDP. Figura traduzida e adaptada de Khan e Gibbons (2014). 30

14 Probabilidade de lançamentos de moeda que resultaram em coroa à medida que o número de lançamentos aumenta. 31

15 Estrutura do código de Monte Carlo (MC) TOPAS MC (SOUZA, 2022). . 32

16 Representação do mecanismo de inclusão de arquivos (SOUZA, 2022). . . . 33

17 Volume cúbico subdividido em 11 bins nas direções x, y e z (NETO et al., 2022). 34

18 (a) Exemplo de parte de um arquivo de entrada no qual o material é definido, uma placa composta por osso de 6 cm de comprimento no eixo z. (b) Configuração típica de materiais que não estão inclusos no código, como água sólida ou PMMA, usando sua composição, frações e densidades (NETO et al., 2022) 37

19 Esquema para definir tamanho de campo quadrado de uma fonte posicionada no ponto B (NETO et al., 2022). 38

20 Ilustração esquemática da irradiação do simulador no TOPAS MC (NETO et al., 2022). 39

21 Validação do código para espectros de 6 (a), 10 (b) e 15 MV (c). O volume alvo simulado de 30 30 30 cm^3 de água foi dividido em 15 bins em x, 15 bins em y e 120 bins em z. 44

22 Resultados das simulações utilizando 10^6, 10^7 e 10^9 histórias (NETO et al., 2022). 45

23 Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 15 MV (NETO et al., 2022). 46

24 Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 6 MV (NETO et al., 2022). 47

25 Gráfico de dose percentual por profundidade para espectros de fótons de 6, 10 e 15 MV. Os feixes incidiram em um bloco de água de 30 30 30 cm^3 com um campo de 10 10 cm^2 (NETO et al., 2022). 48

26 Grá co comparativo de dose percentual por profundidade entre os simuladores A (5 cm de água/3 cm de osso cortical/5 cm de água) e B (5 cm de água/3 cm de pulmão/5 cm de água), ambos irradiados por um espectro de fótons de 15 MV com um campo de 2 2 cm^2 (NETO et al., 2022). . . 49

27 Grá co de dose percentual por profundidade para espectros de elétrons de diferentes energias. Os feixes incidiram em um bloco de água de 30 30 30 cm^3 com um campo de 10 10 cm^2 (NETO et al., 2022). 50

28 Parâmetros de alcance de um feixe de elétrons de 16 MeV. São eles: alcance equivalente a 90% da dose máxima (R_{90}), alcance equivalente a 50% da dose máxima (R_{50}), alcance prático (R_p) e alcance máximo (R_{max}) (NETO et al., 2022). 51

Lista de Tabelas

1 Exemplo de arranjo dos dados de saída de uma simulação do TOPAS MC. 35

2 Simulações didáticas realizadas (NETO et al., 2022). 41

3 Comparação entre os valores obtidos com o TOPAS MC e os valores de referência (SHEIKH-BAGHERI; ROGERS, 2002). O teste de compatibilidade foi realizado a partir da equação 3.2. 44

Lista de Abreviaturas e Siglas

CAD Computer Aided Design

CSDA Countinuous-Slowing-Down Approximation (aproximação por desaceleração contínua)

CSV Comma Separated Values (formato de arquivo)

DCM Digital Imaging and Communications in Medicine (formato de arquivo DICOM)

EGS Electron Gamma Shower

GATE GEANT4 Application For Tomographic Emission

HLX Metade do Comprimento em X

HLY Metade do Comprimento em Y

HLZ Metade do Comprimento em Z

MC Monte Carlo

MCNP6 Monte Carlo N-Particle

PDP Porcentagem de Dose em Profundidade

SSD Source-skin distance (distância fonte-superfície)

TOPAS MC TOol For PArticle Simulation

Sumário

1 INTRODUÇÃO 12

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA 15

2.1 Interação da radiação com a matéria 15

2.1.1 Tipos de radiação 15

2.1.2 Seção de choque 15

2.1.3 Interações de radiação eletromagnética com a matéria 16

2.1.3.1 Efeito fotoelétrico 18

2.1.3.2 Espalhamento Compton 19

2.1.3.3 Produção de pares 21

2.1.3.4 Produção de tripletos 23

2.1.3.5 Atenuação exponencial de fótons 24

2.1.4 Interações de partículas carregadas com a matéria 25

2.1.4.1 Colisão elástica 27

2.1.4.2 Colisão inelástica suave 27

2.1.4.3 Colisão inelástica dura 27

2.1.4.4 Colisão inelástica radiativa 27

2.1.5 Alcance 28

2.1.6 Deposição de dose 28

2.1.6.1 Porcentagem de dose profunda 29

2.2 Método de Monte Carlo 30

2.2.1 Lei dos Grandes Números 30

2.2.1.1 TOPAS MC 31

3 MATERIAIS E MÉTODOS 36

3.1 TOPAS MC 36

3.1.1 Validação do código 38

3.1.2 Estatística 39

3.1.3 Simulações didáticas 40

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES 43

4.1 Validação do código 43

4.2 Estatística 44

4.3 Tamanho de campo 45

4.4 Fótons em meio homogêneo 47

4.5 Fótons em meio heterogêneo 49

4.6 Elétrons 50

5 CONCLUSÕES 52

6 PERSPECTIVAS FUTURAS 54

REFERÊNCIAS 55

1 INTRODUÇÃO

As instituições de ensino superior no Brasil não possuem um currículo uni cado para o curso de graduação em Física Médica, apesar de seus esforços constantes em adaptar os currículos conforme as demandas do cenário pro ssional brasileiro (LEITE; TERINI; SANTOS, 2021). Goulart et al. (2018) e Freitas e Terini (2019) demonstraram que a variação nos conteúdos oferecidos por diferentes instituições re ete a in uência da especialização do corpo docente, resultando em uma distribuição proporcional entre disciplinas experimentais e teóricas (NETO et al., 2022).

Destaca-se a importância da disciplina de Física das Radiações na formação do físico médico, onde o foco reside na interação da radiação com a matéria, caracterizada pela natureza probabilística dessas interações (ATTIX, 1986). Embora seja desa ador prever o resultado de uma única interação, é possível obter um valor esperado de uma quantidade estocástica por meio do valor médio de uma série de medidas. O método de Monte Carlo (MC) emerge como um modelo estatístico para amostragens aleatórias massivas, visando resultados numéricos que se aproximam dos valores esperados para problemas especí cos, como as grandezas dosimétricas em Física Médica (JENKINS; NELSON; RINDI, 2012; NETO et al., 2022).

Observa-se uma lacuna na literatura voltada ao ensino de Física Médica, pois a simulação de Monte Carlo para o transporte de radiação na matéria não é amplamente abordada (ATTIX, 1986; OKUNO; YOSHIMURA, 2016; PODGORSAK et al., 2003; TAUHATA et al., 2003). Embora livros mais recentes, como de Andreo et al. (2017) e Turner (2007), abordem simulações de Monte Carlo, a linguagem e conteúdo utilizados são mais avançados do que o exigido em cursos de graduação em Física Médica. Assim, evidencia-se a necessidade de materiais que abordem a simulação de MC no contexto da Física das Radiações (NETO et al., 2022).

Recentemente, Hartikainen et al. (2019) apresentaram evidências que indicam a urgência de aumentar o engajamento ativo dos estudantes durante o processo de aprendizagem.

Ferramentas que promovam interação, visualização e exempli cação de conteúdos teóricos são essenciais para uma formação abrangente dos graduandos (NETO et al., 2022).

Pater, Vallières e Seuntjens (2014) demonstraram o impacto no conhecimento dos alunos antes e após a realização de um projeto envolvendo simulações de Monte Carlo em Física Médica. Antes do projeto, 76% dos alunos tinham nenhum ou pouco conhecimento. Após o projeto, 65% dos alunos tinham conhecimento bom ou muito bom (NETO et al., 2022).

Yoriyaz (2009), em sua abordagem sobre os princípios e aplicações em Física Médica, apresentou um panorama abrangente que se estende desde a evolução histórica do método de MC, inicialmente empregado nos jogos de azar, até suas atuais e destacadas aplicações nas três principais áreas da Física Médica: radiodiagnóstico, medicina nuclear e radioterapia (NETO et al., 2022).

No estudo conduzido por Rebello et al. (2015), a avaliação dos resultados decorrentes da implementação do método de MC revelou-se uma abordagem fundamental no âmbito de um curso de mestrado em engenharia nuclear. Durante um período de sete anos, os autores analisaram os impactos e desdobramentos dessa metodologia, chegando à conclusão de que a relação custo/benefício associada à sua aplicação é positiva (NETO et al., 2022).

Por outro lado, porém, ainda no ensino, existem estudos que utilizam o método de Monte Carlo de outra maneira. Por exemplo, realizando a avaliação dosimétrica de aparelhos ou fontes utilizados didaticamente em Física Médica (JUSTINO et al., 2019; JÚNIOR et al., 2020). Independentemente da abordagem utilizada, ca claro tanto a ligação entre o método de MC e a disciplina de Física das Radiações quanto às oportunidades de aprendizado sempre que o método é implementado (NETO et al., 2022).

Diversos estudos apontam para a relevância do método de Monte Carlo em diferentes contextos da Física Médica, incluindo as suas aplicações em radiologia diagnóstica, medicina nuclear e radioterapia. A escolha de códigos, como GEANT4 (AGOSTINELLI et al., 2003), PENELOPE (SALVAT; FERNÁNDEZ-VAREA; SEMPAU et al., 2006), Monte Carlo N-Particle (MCNP6) (GOORLEY et al., 2012), GEANT4 Application For Tomographic Emission (GATE) (JAN et al., 2004) e Electron Gamma Shower (EGS) (FORD; NELSON, 2006), para simulações destaca a variedade de ferramentas disponíveis. O lançamento do TOol For PArticle Simulation (TOPAS MC), baseado no GEANT4, visa facilitar o acesso às simulações de MC na comunidade cientí ca, eliminando a necessidade de conhecimento prévio em programação C++ (NETO et al., 2022).

O TOPAS MC, uma ferramenta gratuita, proporciona uma curva de aprendizado mais curta em comparação com outros códigos, tornando as simulações de MC mais acessíveis. Sua abordagem baseada em arquivos de texto para controlar toda a geometria da simulação, sem a exigência de conhecimento prévio de linguagens de programação, representa uma vantagem signi cativa (NETO et al., 2022).

O trabalho proposto visa levar tópicos do ensino de Física das Radiações aos professores e estudantes brasileiros de graduação em Física Médica de maneira didática e interativa, através das simulações de Monte Carlo utilizando o código TOPAS MC.

É importante ressaltar que este trabalho foi produzido em grupo. A colaboração de André Luiz Espindola Fidelis na revisão bibliográ ca e confecção de grá cos, Arthur Moreira Rocha na descrição do código, Felipe Marques Lucas de Souza na redação e confecção de guras e Larissa Gabriela Oliveira de Santana no desenvolvimento de materiais auxiliares para tratamento de dados, sob orientação de Simone Coutinho Cardoso e Luiz Antonio Ribeiro da Rosa, foi crucial para a avaliação proposta.

Este trabalho colaborativo foi publicado como artigo na Revista Brasileira de Ensino de Física (NETO et al., 2022).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Interação da radiação com a matéria

2.1.1 Tipos de radiação

Uma maneira de classi car a radiação é a partir da sua capacidade de ionizar ou não a matéria, ou seja, radiação ionizante e não ionizante, respectivamente. A radiação ionizante é aquela capaz de ionizar um átomo ou molécula, transferindo energia ao meio de forma que no mínimo um elétron seja ejetado. Caso contrário, a radiação é considerada como não ionizante. Essas de nições estão diretamente relacionadas à energia da radiação em questão. Além dessa classi cação, tradicionalmente a radiação ionizante é dividida em direta e indiretamente ionizante para descrever radiação de partículas carregadas e não carregadas, respectivamente. Como toda radiação, independente de sua natureza, dada a energia necessária, possui potencial de excitar e ionizar a matéria, é mais correto classi cá-la em termos da transferência de energia. A radiação que transfere energia diretamente é aquela que interage com a matéria por campo coulombiano ao longo de sua trajetória, logo, é toda radiação que possui carga (i.e. elétrons, pósitron, prótons, partículas alfa, entre outros). A radiação que transfere energia indiretamente é aquela que transfere energia para partículas carregadas no meio que atravessam em relativamente poucas grandes interações. As partículas carregadas resultantes dessas interações entregam energia para o meio por campo coulombiano ao longo de sua trajetória. Logo, a radiação que transfere energia indiretamente é toda radiação que não possui carga (i.e. nêutrons e fótons de raios-x e gama).

2.1.2 Seção de choque

A grandeza que determina as regiões descritas na Figura 2 é a seção de choque. Trata-se de um parâmetro de um processo estocástico, dado pela área efetiva que o feixe de partículas - fótons, para este trabalho - atinge. Por isso, a seção de choque possui

unidade de área, o barn (1 barn = 10^{-24} cm^2). Para cada efeito há uma seção de choque, dada a energia do fóton e o meio com o qual ele irá interagir. A Figura 1 apresenta a relação entre seção de choque e energia de fótons incidentes para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares e tripletos (veja 2.1.3) em alvos de carbono.

Figura 1: Seções de choque para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, produção de pares e tripletos em carbono. Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

2.1.3 Interações de radiação eletromagnética com a matéria

A maneira que os fótons interagem com a matéria depende do meio absorvedor e, principalmente, da energia do fóton, que é dada por:

$$E = h \quad \text{ou} \quad E = \frac{hc}{} \tag{2.1}$$

Onde h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz, é a frequência do fóton e é o comprimento de onda do fóton. A distância entre átomos de estruturas cristalinas de sólidos varia de 0,3 a 0,5 nm. Fótons que possuem comprimentos de onda maiores que essa distância - com energias menores que aproximadamente 4 keV - interagem com a matéria como um todo. Para este trabalho, as energias de interesse estão acima de 1 MeV e serão consideradas somente interações individuais entre fótons e átomos. Logo, a física das interações que serão abordadas é determinada pela seção de choque de átomos (veja 2.1.2).

Há três principais interações de fótons com a matéria: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares. A Figura 2 apresenta a dominância de cada efeito em relação à energia do fóton e do número atômico do material que ele interage. É por meio dessas interações que fótons transferem sua energia para partículas carregadas e estas, por sua vez, depositam energia no meio ao longo de suas trajetórias por interações coulombianas (veja 2.1.4).

Figura 2: Importância relativa dos três principais tipos de interações de fótons. Figura traduzida e adaptada de Andreo et al. (2017).

Além desses efeitos, há mais dois tipos de espalhamento estudados na física das radiações relevantes para a faixa de energia de interesse deste trabalho (1 keV a MeV): Rayleigh, também chamado de espalhamento coerente, e Thomson. O espalhamento Rayleigh ocorre quando um fóton de baixa energia interage com a nuvem eletrônica de um átomo, de Z elevado, como um todo. O átomo sofre um recuo para conservar momento e emite um fóton em um ângulo de espalhamento pequeno de energia próxima ao do fóton incidente para conservar energia e retornar ao seu estado original. O espalhamento Thomson ocorre quando um fóton interage com um elétron fracamente ligado, colocando-o em um movimento oscilatório. Nesta con guração, o elétron emite um fóton de mesma frequência que o fóton incidente. No entanto, o espalhamento Rayleigh é relevante somente para feixes estreitos de fótons de baixa energia e a transferência de energia líquida realizada pelo espalhamento Thomson por um fóton resulta somente em outro fóton de mesma energia.

Nenhum dos casos é relevante para este trabalho.

2.1.3.1 Efeito fotoelétrico

Considera-se o efeito fotoelétrico a interação mais importante de fótons de energias mais baixas com a matéria em termos de seção de choque e quantidade de energia transferida ao elétron secundário.

Este efeito, representado na Figura 3, é caracterizado por um fóton incidente de energia h que interage com um elétron fortemente ligado ao átomo por uma energia potencial U. A energia do fóton é transferida ao elétron e este é ejetado a um ângulo com energia cinética $T = h \quad U$. O átomo sofre um recuo a um ângulo $\quad$ para conservar momento, mas essa energia recebida por ele é negligenciável quando comparada à massa do núcleo.

Figura 3: Ilustração do efeito fotoelétrico.

A seção de choque total para o efeito fotoelétrico $_{ef}$ é proporcional ao Z do material absorvedor e inversamente proporcional à energia h do fóton incidente:

$$_{ef} \quad k\frac{Z^{n}}{h^{m}} \tag{2.2}$$

Onde k é uma constante e m e n são variáveis arbitrárias dependentes da energia do fóton. É notável que h tenha que ser maior que U para que o elétron seja ejetado. Por isso, ao analisar a seção de choque do efeito fotoelétrico em função da energia do fóton incidente para dado material (Figura 4), é possível observar bordas de absorção característica nas energias referentes às energias de ligação de cada subcamada eletrônica. O termo "característico" implica que cada elemento possui uma con guração diferente de bordas de absorção fotoelétrica.

Figura 4: Seções de choque do efeito fotoelétrico para ouro Z (= 79). Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

Na física médica, o estudo do efeito fotoelétrico é essencial para blindagens de radiação e desenvolvimento de equipamentos médicos de radiodiagnóstico, uma vez que para obtenção de imagens utiliza-se energias até a faixa de 10^{-1} MeV.

2.1.3.2 Espalhamento Compton

O espalhamento Compton, representado na Figura 5, descreve a incidência de um fóton de energia h em um elétron fracamento ligado, considerado livre e estacionário. Esta interação resulta na transferência de energia para o elétron, ejetando-o com energia cinética T a um ângulo , e, para conservação de momento, a formação de um fóton espalhado a um ângulo θ com energia h^{0} dada pela equação 2.3.

Figura 5: Ilustração do espalhamento Compton.

$$h\ ^{0} = \frac{h}{1 + \frac{h}{m_e c^2}(1 \quad \cos\ )} \tag{2.3}$$

Onde m_e é a massa de repouso do elétron. A energia do sistema pode ser descrita pela equação 2.4.

$$h\ = T + h\ ^{0} \tag{2.4}$$

O espalhamento Compton também é chamado de espalhamento incoerente, uma vez que sua seção de choque está associada a contribuição de elétrons fracamente ligados e o espalhamento não é uma ação combinada do átomo como um todo. A seção de choque para o espalhamento Compton foi descrita utilizando eletrodinâmica quântica por Klein e Nishina (1928) e é dada por:

$$_{C} = \ _{KN} \quad S \tag{2.5}$$

$$_{KN} = \frac{r_e^2}{2}\frac{h\ ^{0}}{h} \quad \frac{h}{h\ ^{0}} + \frac{h\ ^{0}}{h} \quad \sin^2 ' \tag{2.6}$$

Onde $_{KN}$ é a seção de choque de Klein-Nishina do espalhamento Compton por elétron, S é o fator de espalhamento incoerente e r_e é o raio do elétron. A Figura 6 mostra a curva de seção de choque para o efeito Compton em função de energia do fóton incidente para ouro e é possível notar que seus valores máximos se encontram na faixa de energia de $10\ ^{1}$ a 10 MeV.

Figura 6: Seções de choque do efeito Compton para ouro Z (= 79). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

O espalhamento Compton é a interação mais presente em tratamentos de radioterapia, uma vez que, geralmente, utiliza-se aceleradores lineares que produzem feixes polienergéticos de fótons de energia máxima variando de 6 até 15 MeV. Esse tipo de interação é essencial para a análise de distribuição de dose em tecidos, tornando-se crucial para o planejamento preciso de tratamentos.

2.1.3.3 Produção de pares

Produção de pares, representada na Figura 7, é um processo de absorção no qual um fóton de energia h 1;022 MeV, sob a presença de um campo coulombiano de um núcleo atômico, dá origem a um elétron e um pósitron de energias cinéticas T^- e T^+, respectivamente. O núcleo do alvo sofre um recuo para conservar momento, mas recebe uma energia cinética negligenciável, considerada nula. É possível também, com menor probabilidade, que esse processo ocorra sob a presença de campos coulombianos de elétrons atômicos (veja 2.1.3.4).

Figura 7: Ilustração da produção de pares.

Quanto maior a energia do fóton, mais frontalmente é projetado o par elétron-pósitron. As duas partículas carregadas não necessariamente recebem a mesma energia cinética, mas suas médias, em MeV, são dadas por:

$$T = \frac{h \quad 1{,}022}{2} \tag{2.7}$$

A atração e repulsão nuclear tendem a dar uma energia ligeiramente mais elevada ao pósitron em relação ao elétron (a diferença sendo de, no máximo, 0,0275 MeV). A seção de choque para produção de pares $_{PP}$ é dada por:

$$_{PP} = \frac{r_e^2 Z^2 P}{137} \tag{2.8}$$

Onde P é o valor médio de um parâmetro dependente de h e Z, resultante da integral de todos valores de energia do pósitron T^+. A Figura 8 apresenta os valores de seção de choque da produção de pares em função da energia do fóton incidente para ouro, deixando evidente a dominância dessa interação para energias acima de 10 MeV.

Figura 8: Seções de choque de produção de pares para outros Z ($= 79$). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

2.1.3.4 Produção de tripletos

A produção de tripletos, representada na Figura 9, ocorre quando há produção de pares na vizinhança de um elétron orbital. Este elétron também recebe energia e, junto ao par elétron-pósitron formado, tende a seguir a trajetória do fóton incidente.

Figura 9: Ilustração da produção de tripletos.

A energia cinética média de cada uma das três partículas, T, em MeV, é dada por:

$$T = \frac{h \quad 1{,}022}{3} \tag{2.9}$$

A seção de choque para produção de tripletos, σ_T pode ser expressa em função da produção de pares:

$$_{PT} \quad \frac{PP}{CZ} \tag{2.10}$$

Onde C é um parâmetro que depende somente de Z. A Figura 10 mostra a seção de choque da produção de tripletos em função da energia do fóton incidente para ouro, deixando evidente a dominância dessa interação para energias acima de 10 MeV, assim como a produção de pares. No entanto, os valores máximos da curva demonstram a diferença de uma unidade de grandeza quando comparada a seção de choque para produção de pares.

Figura 10: Seções de choque de produção de tripletos para ouro (Z = 79). Grá co traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

2.1.3.5 Atenuação exponencial de fótons

Como visto nos itens anteriores, fótons são completamente absorvidos pelo meio quando interagem com a matéria, podendo ou não gerar outros fótons. Um único fóton pode atravessar uma camada espessa de matéria sem interagir. Logo, não há como de nir um alcance limitante de fótons pela matéria.

A natureza probabilística da interação do fóton (e de outras partículas não carregadas), em uma con guração de feixe estreito - desta forma, desconsiderando fótons espalhados -, representada na Figura 11, descreve um comportamento exponencial decrescente do número de fótons em função da profundidade do meio impingido. Dessa forma, originou-se a lei da atenuação exponencial, representada pela equação 2.11

Figura 11: Esquema de irradiação de feixe estreito. Figura traduzida e adaptada de Bushberg et al. (2012).

$$\frac{N}{N_0} = e^{\ t} \tag{2.11}$$

Onde N_0 é o número inicial de fótons de um feixe incidente perpendicular à uma espessura t de matéria, N é o número de fótons que atravessa t e é o coe ciente de atenuação linear. é obtido pela soma das seções de choque das interações possíveis de fótons com a matéria. Logo, ca clara a relação dessa grandeza com a energia do feixe e o tipo de material que compõe o meio irradiado por tal feixe.

$$= \frac{N_A}{A}[\ _{ef} + \ _C + \ _{PP} + \ _T + \ _R] \tag{2.12}$$

Onde é a densidade do meio absorvedor, N_A é o número de Avogadro, A é a massa atômica do elemento que compõe o material do meio absorvedor, e $_R$ são as seções de choque para os espalhamentos Thomson e Rayleigh, respectivamente.

2.1.4 Interações de partículas carregadas com a matéria

As interações de partículas carregadas com a matéria resultam na mudança de trajetória e perda de energia das partículas em questão. O meio no qual elas são impingidas também sofre mudanças, pois os átomos são excitados ou ionizados. Todas as interações dessas partículas são governadas pelas forças coulombianas entre as cargas envolvidas. No entanto, a diferença de massa e spin dentre partículas carregadas afeta signi cativamente o ângulo de espalhamento ou de exão e a magnitude da energia transferida em colisões.

Logo, faz sentido considerar partículas carregadas leves (i.e. elétrons e pósitrons) separadamente das partículas carregadas pesadas, com massas maiores que a de elétrons (i.e. prótons, partículas , íons de carbono, entre outras).

Os processos de espalhamento por efeito coulombiano de partículas carregadas são chamados de colisões. Não são colisões literais, o termo foi escolhido como analogia à mecânica clássica. As colisões são classi cadas de acordo com o parâmetro de impacto b (a distância entre o projétil e o núcleo do alvo), conforme indica a Figura 12.

Figura 12: Diagrama simpli cado das principais interações de partículas carregadas com o átomo, dependendo do parâmetro de impacto b relativo ao raio atômico r_a. Colisão inelástica dura (a) e suave (b), para $b \quad r_a$ e $b \quad r_a$, respectivamente, e colisão inelástica radiativa (c) e elástica (d), para $b \quad r_a$ (SOUZA, 2022)

O valor esperado da taxa de perda de energia T da partícula carregada de tipo Y incidente por unidade de profundidade x do material de número atômico Z é chamado de poder de freamento $(dT=dx)_{T;Y;Z}$. Dividindo esse valor pela densidade do meio absorvedor, obtem-se o poder de freamento mássico $dT=dx$. Uma partícula carregada pode perder energia por meio de colisões e por perdas radiativas, como radiação de freamento e aniquilação em voo. A perda radiativa é mais presente ao considerar partículas carregadas leves, pois esse tipo de interação para partículas carregadas pesadas é negligenciável (veja 2.1.4.4). Logo, faz sentido subdividir o poder de freamento total em uma fração colisional e uma fração radiativa:

$$\frac{dT}{dx} = \frac{dT}{dx}_c + \frac{dT}{dx}_r \tag{2.13}$$

Onde os termos subscritos c e r representam as interações de colisionais e radiativas, respectivamente.

2.1.4.1 Colisão elástica

Para o caso em que $b \gg r_a$, a interação se dá pelos campos coulombianos da partícula projétil e do núcleo do atómo alvo. Para esta interação, os estados quânticos iniciais e finais do átomo alvo são os mesmos, ou seja, não há exitação ou ionização. Há uma perda de energia da partícula carregada incidente para conservação de momento do sistema, exceto nos casos de prótons com energias cinéticas menores que 20 keV e partículas com energias cinéticas menores que 150 keV.

A seção de choque para colisão elástica depende da massa, tornando esta interação mais importante para elétrons e pósitrons do que para partículas carregadas pesadas. Por isso, essas partículas leves possuem trajetórias tortuosas, especialmente em meios de número atômico alto. Logo, a seção de choque para esta interação é diretamente proporcional ao Z do meio.

2.1.4.2 Colisão inelástica suave

Para o caso em que $b \gg r_a$, a interação se dá pelos campos coulombianos da partícula projétil e do átomo como um todo. Com isso, há uma distorção da configuração do átomo, excitando-o a um nível de energia mais elevado e muitas vezes o ionizando. A condição $b \gg r_a$ é muito mais provável que $b \ll r_a$, logo, colisões inelásticas suaves são as interações predominantes para partículas carregadas.

2.1.4.3 Colisão inelástica dura

Para o caso em que $b \ll r_a$, a interação ocorre com um único elétron atômico, normalmente de camadas mais internas, que pode ser ejetado com uma energia cinética elevada. Nesses casos, tais elétrons são chamados de raios-δ.

2.1.4.4 Colisão inelástica radiativa

As interações inelásticas no caso em que $b \ll r_a$ resultam na emissão de um fóton. Este fóton é chamado de radiação de freamento, ou bremsstrahlung ("bremse" = freio; "strahlung" = radiação, em alemão) pois é resultado do freamento da partícula incidente pelo campo coulombiano do núcleo do átomo.

Essa interação é responsável pela produção de feixes polienergéticos (espectros) de fótons. Um espectro de fótons de 6 MV, por exemplo, é gerado pelo bombardeamento

de elétrons acelerados por uma diferença de potencial de 6 megavolts em um alvo de alto valor de Z e ponto de fusão, como tungstênio (Z = 74; ponto de fusão = 3422°C) e molibdênio (Z = 42; ponto de fusão = 2623°C). Por esse motivo, espectros de fótons são caracterizados pela diferença de potencial dos elétrons que irão produzí-los, ou seja, em megavolts em vez de mega elétron-volts.

Outra interação que envolve perda radiativa é aniquilação em voo, na qual um pósitron é aniquilado quando se encontra com um elétron, resultando em dois fótons emitidos de maneira diametralmente oposta.

2.1.5 Alcance

O conceito de alcance R é de suma importância para física das radiações diretamente ionizantes. Attix (1986) de ne esta grandeza não estocástica como o valor esperado do comprimento do percurso que uma partícula carregada de dado tipo em dado meio segue até atingir repouso, descontando movimento térmico.

Uma grandeza semelhante mas não idêntica, o alcance CSDA (Continuous-Slowing-Down Approximation) R_{CSDA}, representa uma aproximação por desaceleração contínua da partícula carregada no meio. Esse alcance pode ser de nido em termos do poder de freamento mássico pela equação 2.14.

$$R_{CSDA} = \int_0^{T_0} \frac{dT}{dx}^{-1} dT \tag{2.14}$$

Onde T_0 é a energia inicial da partícula carregada, R_{CSDA} possui a unidade de g/cm^2 quando o poder de freamento dT/dx é dado em MeV cm^2/g e o integrando dT é dado em MeV.

2.1.6 Deposição de dose

A dose absorvida D é uma grandeza não estocástica que representa valor esperado da energia transmitida pelas interações descritas nas seções 2.1.4.3 e 2.1.4.2 à matéria por unidade de massa em um ponto P.

$$D = \frac{d}{dm} \tag{2.15}$$

Onde d é o valor médio de energia transmitida para um volume in nitesimal dv no

ponto P durante um intervalo de tempo, e dm é a massa contida em dV. A unidade de dose é J=kg, denominada como gray (Gy).

Nota-se que a dose absorvida representa a energia por unidade de massa que permanece no meio em P para produzir quaisquer efeitos atribuíveis à radiação. Alguns efeitos são proporcionais a D, enquanto outros - como dano celular, importante para a física da radioterapia - possuem uma dependência mais complexa. Invariavelmente, quando D = 0 não pode haver efeitos relacionados à radiação. Portanto, conclui-se que a dose absorvida é a grandeza mais importante para física das radiações.

O processo pelo qual a energia de um feixe de fótons é convertida em transmissão de energia no meio pode ser convenientemente dividido em duas etapas: a transferência de energia dos fótons para elétrons do meio e a deposição da dose ao meio por essas partículas carregadas. Como a energia das partículas carregadas em interações inelásticas radiativas não são transmitidas diretamente para o meio, considera-se somente a componente colisional do poder de freamento para o cálculo de dose:

$$D = \frac{dT}{dx}_{c} \tag{2.16}$$

Onde é a uência de energia, ou seja, a quantidade total de energia radiante de, neste caso, partículas carregadas que incide sobre uma determinada área durante um determinado período de tempo. Logo, ca claro que somente partículas carregadas depositam dose no meio ao longo de sua trajetória.

2.1.6.1 Porcentagem de dose profunda

Uma maneira de caracterizar a distribuição de dose no eixo central de um determinado volume irradiado é normalizar a dose a uma profundidade em função de uma valor de dose de referência. Normalmente, o valor de referência é o valor de dose máxima, mas há técnicas de caracterização que utilizam algumas profundidades especí cas dependendo do tamanho e formato do volume irradiado. Além disso, o campo mais utilizado para a determinação da distribuição de dose é 10 10 cm^2 (IAEA, 2001). A grandeza porcentagem de dose profunda (PDP) pode ser de nida pela razão da dose absorvida a qualquer profundidade d pela dose absorvida na profundidade de referência d_0 (equação 2.17 ao longo do eixo central do feixe, de acordo com a Figura 13.

$$PDP = \frac{D_d}{D_{d_0}} \tag{2.17}$$

Figura 13: Esquema de irradiação para obter PDP. Figura traduzida e adaptada de Khan e Gibbons (2014).

2.2 Método de Monte Carlo

2.2.1 Lei dos Grandes Números

O método de Monte Carlo é um modelo estatístico baseado na Lei dos Grandes Números: O valor esperado de uma variável é dado pelo número médio de valores medidos dessa variável, com n tendendo ao in nito.

$$\lim_{n \to \infty} X_n = E(X) \tag{2.18}$$

Sendo X_n o valor médio de n valores e $E(X)$ o valor esperado desta variável. A Figura 14 apresenta um exemplo, de lançamento de moedas, utilizando a proporção de cair coroa como variável. Quanto maior for o número de lançamento de moedas, mais próximo de 50%, que é o valor esperado, a proporção se aproxima.

Figura 14: Probabilidade de lançamentos de moeda que resultaram em coroa à medida que o número de lançamentos aumenta.

Este modelo é muito prático no estudo do transporte da radiação, uma vez que a interação da radiação com a matéria também é probabilística. Neste caso, a distribuição estatística é dada pelas seções de choque de cada tipo de interação possível, discutidas nas seções 2.1.3 e 2.1.4.

A generalidade e literalidade nas simulações pelo método de Monte Carlo reduzem a necessidade de suposições especiais. Campos de radiação não precisam ser uniformes, paralelos ou monoenergéticos, por exemplo. Alvos podem apresentar qualquer formato ou composição. Essa liberdade proporciona resultados mais compatíveis com a realidade.

2.2.1.1 TOPAS MC

Há uma variedade de códigos que podem ser utilizados para simulações, dentre os mais conhecidos estão: TOPAS MC, GEANT4, PENELOPE, MCNP6, GATE, EGS, entre outros. O código TOPAS MC (PERL et al., 2012; FADDEGON et al., 2020) foi criado originalmente com o intuito de simular o transporte de prótons pela matéria e abrange as bibliotecas do GEANT4. Ele possui algumas vantagens em relação aos outros códigos como livre acesso, curva de aprendizado curta e não exige conhecimentos de linguagem

de programação (SOUZA, 2022).

De acordo com os desenvolvedores do TOPAS MC, as simulações de Monte Carlo são subaproveitadas na comunidade científica devido à dificuldade associada à escrita de código em uma linguagem de programação específica. Para superar esse obstáculo, o código foi desenvolvido com o objetivo de expandir o uso dessa ferramenta no meio acadêmico (SOUZA, 2022). Outra dificuldade presente em códigos de Monte Carlo (MC), incluindo o TOPAS MC, é a demanda do processamento computacional. Logo, o tempo de cada simulação depende principalmente da robustez do processador do computador utilizado. Além disso, caso o usuário tenha interesse em visualizar o arranjo experimental simulado, a configuração da placa gráfica do computador utilizado torna-se relevante.

O código opera por meio de parâmetros e linhas individuais. A sintaxe pode ser resumida por:

[Classe do Parâmetro] : [Nome do Parâmetro] = [Valor do Parâmetro]

Os parâmetros são divididos em: física, geometria, fonte, recurso temporal, material, elementos, isótopos, gráficos, redução de variância, registro e controle geral do TOPAS MC. Cada parâmetro possui uma classe específica relacionada ao seu valor: textual, decimal, inteiro, adimensional, booleano ou vetor dimensional. O único requisito para o usuário é criar um arquivo de texto simples com os parâmetros que controlam a simulação. Esse arquivo pode conter, opcionalmente, outros arquivos de parâmetros. A Figura 15 apresenta a estrutura do código TOPAS MC.

Figura 15: Estrutura do código de Monte Carlo (MC) TOPAS MC (SOUZA, 2022).

A hierarquia de controle no código possibilita que um arquivo de parâmetros contenha um ou mais arquivos de parâmetros e assim por diante, de acordo com a Figura 16. Esse sistema é crucial no código, pois permite que um arquivo base de entrada contenha apenas alguns de seus parâmetros substituídos por novos arquivos. Além disso, esse mecanismo possibilita que um grupo de usuários trabalhe em partes independentes de uma mesma simulação (SOUZA, 2022).

Figura 16: Representação do mecanismo de inclusão de arquivos (SOUZA, 2022).

Os componentes geométricos disponíveis no código podem ser modelados a partir de estruturas simples como cubos, cilindros e esferas, até estruturas complexas típicas da radioterapia como colimadores multilâminas, discos moduladores de alcance e aplicadores. Além disso, o TOPAS MC aceita arquivos de geometria de outros programas modeladores como Blender (2018) e CAD, estendendo mais ainda a variedade de estruturas possíveis nas simulações. Essas estruturas podem ser posicionadas de maneira absoluta ou relativas a outra(s) estrutura(s).

As fontes de radiação podem ser atribuídas a qualquer compontente geométrico. A sua con guração depende da escolha de partícula emitida (fótons, pósitrons, elétrons, partículas , prótons, nêutrons, deuterons, entre outros), sua distribuição de energia e distribuição angular e espacial da propagação dos feixes (SOUZA, 2022).

O volume alvo (dosímetro) pode ser subdividido em bins, onde cada bin recebe o tratamento matemático escolhido pelo usuário. Essa subdivisão em bins é feita em cada uma das direções x, y e z. A Figura 17 mostra um exemplo de divisão de um volume cúbico em 11 bins nas três direções. Como exemplo, escolhendo o número de bins 11 para as 3 direções em um volume cúbico, o volume total é subdividido em 1.331 cubos iguais (NETO et al., 2022).

Figura 17: Volume cúbico subdividido em 11 bins nas direções x, y e z (NETO et al., 2022).

Há dois tipos básicos de registros, ou scorers no TOPAS MC: volumétricos ou superciais. Os volumétricos são utilizados para cálculos de doses ou energia, por exemplo. E os superciais são adequados para a contagem de caminhos (interações) ou espaço de fase. Essa escolha deve ser especicada na linha relativa à grandeza do registro. Ao selecionar, por exemplo, DoseToMedium, o volume escolhido para o output receberá o cálculo da dose depositada, dividida pela massa em cada subvolume (voxel), de acordo com a equação 2.15, gerando assim uma tabela como resultado de saída, contendo a dose em cada voxel. Há outros scorers utilizados no código para cálculo de dose, como DoseToWater e DoseToMaterial, que calculam a dose depositada em cavidades de Bragg-Gray de água e de outros materiais especicados pelo usuário, respectivamente, por uma razão de doses definidas pela equação 2.16 (ATTIX, 1986, p.231-241). Um aspecto importante para o registro é a escolha do relatório da simulação. Por padrão, o TOPAS MC considera o cálculo da soma da grandeza, mas é possível editar esse relatório para que retorne o valor médio, valor mínimo, valor máximo, desvio padrão, variância, entre outros.

No TOPAS MC é possível escolher o formato de saída do arquivo relativo ao tipo de registro definido, tais como .CSV, .dat, .root e .DCM. Os mais fáceis de trabalhar são .csv e .dat, visto que arquivos do tipo ROOT e DICOM necessitam de programas externos para acessar as informações de saída. O arquivos de saída usados neste trabalho constam como .csv. Os dados dos arquivos são divididos por vírgulas em quatro valores, onde os 3 primeiros valores da linha registram os bins relativos aos eixos x, y e z, respectivamente. A partir do quarto valor, serão registradas as grandezas previamente escolhidas pelo usuário (NETO et al., 2022).

A tabela 1 apresenta um exemplo ilustrativo de saída de uma simulação que usa o scorer DoseToMedium e seu desvio padrão numa caixa de $20 \times 20 \times 20\,cm^3$ com 2 bins em x, y e z irradiada por um feixe de fótons de 10^6 histórias de um campo $10 \times 10\,cm^2$.

Tabela 1: Exemplo de arranjo dos dados de saída de uma simulação do TOPAS MC.

x	y	z	Dose (Gy)	Desvio Padrão (Gy)
0	0	0	1,624442624859057e-08	6,290061820713059e-14
0	0	1	1,208258115781291e-08	5,518827499198621e-14
0	1	0	1,634844082332165e-08	6,32662031638801e-14
0	1	1	1,214301015295405e-08	5,536633481201251e-14
1	0	0	1,632034418719286e-08	6,31601462384405e-14
1	0	1	1,216551748228767e-08	5,564029699314675e-14
1	1	0	1,637091529005374e-08	6,332387511454294e-14
1	1	1	1,213259892551832e-08	5,545941433449933e-14

A utuação estatística dos resultados simulados depende diretamente da razão entre o número de histórias N_h e o volume de cada voxel. Um número maior de bins diminui o tamanho dos voxels que compõe um volume, que leva a uma análise mais detalhada do material. Porém, um número maior de bins requer um número de histórias maior, para que possamos otimizar o número de interações das partículas naquele voxel e contabilizar a dose depositada com menor utuação estatística. O código calcula a variância - e, portanto, o desvio padrão, por este ser a raiz quadrada da variância - associada a distribuição da grandeza de interesse. Logo, para obter-se o valor da incerteza pelo desvio padrão de uma simulação, é necessário levar em consideração o que foi solicitado no relatório:

$$DP_S = DP_T \sqrt{N_h} \tag{2.19}$$

$$DP_M = \frac{DP_T}{\sqrt{N_h}} \tag{2.20}$$

Onde DP_s é o desvio padrão da soma, DP_m é o desvio padrão da média, DP_T é o desvio padrão obtido pelo TOPAS MC e N_h é o número de histórias simuladas.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Com o propósito de alcançar os objetivos estabelecidos neste estudo, foram escolhidos alguns cenários de simulação que possibilitam discutir importantes aspectos físicos relacionados à radioterapia. Inicialmente, foi realizada a validação do TOPAS MC para os feixes de energia utilizados. A partir disso, foram conduzidas simulações de modo a avaliar a in uência dos seguintes parâmetros: estatística das curvas pelo número de histórias; tamanho do campo de irradiação; meios homogêneos e heterogêneo; feixes incidentes de diferentes naturezas. Essa análise abrangente pode ser feita avaliando os grá cos de Porcentagem de Dose em Profundidade (PDP) (veja 2.1.6.1), isodose e per l de dose a partir dos dados de saída. Neste trabalho, o enfoque foi direcionado exclusivamente à análise das curvas de PDP para as simulações citadas (NETO et al., 2022).

As simulações foram realizadas em quatro computadores com os seguintes processadores:

- Intel Core i5-10210U (1.6 GHz; 8 threads);
- AMD Ryzen 5 4600G (3.7GHz; 12 threads);
- AMD Ryzen 7 5700G (3.8 GHz; 16 threads);
- Intel Core i9 12900K (3.2 GHz; 24 threads).

3.1 TOPAS MC

Para o arquivo de entrada, o usuário deve planejar a geometria e informar as dimensões e coordenadas para de nir o alvo. As dimensões devem ser adicionadas com os valores pela metade (Half Length) em cada direção: HLX, HLY e HLZ. O material deve ser informado para con gurar o sistema, sendo possível incluir os materiais pré-de nidos da biblioteca da GEANT4, já incluso no código (Figura 18a), ou de nir os materiais através dos elementos que os compõem (hidrogênio, oxigênio, carbono, entre outros), frações de

peso e densidade das amostras que serão irradiadas (Figura 18b) (NETO et al., 2022).

Para cada geometria criada, deve-se escolher onde o objeto será posicionado em relação ao seu centro, além de informar as dimensões, como altura, largura, profundidade e raio. Também é possível rotacionar esse objeto, devendo informar os graus de rotação nas direções x, y e z (NETO et al., 2022).

Figura 18: (a) Exemplo de parte de um arquivo de entrada no qual o material é de nido, uma placa composta por osso de 6 cm de comprimento no eixo z. (b) Con guração típica de materiais que não estão inclusos no código, como água sólida ou PMMA, usando sua composição, frações e densidades (NETO et al., 2022)

A con guração utilizada para determinar os campos de radiação cônicos depende do ângulo de abertura do feixe, como discutido na seção 2.2.1.1. O valor do ângulo nas direções perpendiculares à direção do feixe, em radianos, é calculado em função da distância da fonte à superfície irradiada (SSD) e do tamanho de campo quadrado desejado a partir da equação 3.1. A de nição do tamanho de campo é ilustrada na Figura 19 (NETO et al., 2022).

Figura 19: Esquema para de nir tamanho de campo quadrado de uma fonte posicionada no ponto B (NETO et al., 2022).

$$\text{BeamAngularCutO X} = \text{BeamAngularCutO Y} = \quad = \arctan \frac{A=2}{SSD} \tag{3.1}$$

Onde A é o tamanho da aresta do campo quadrado.

3.1.1 Validação do código

Antes de iniciar o planejamento e a execução das simulações através do TOPAS MC, é necessário validar o código. Isso deve ocorrer de modo a veri car a compatibilidade dos outputs do TOPAS MC com os resultados teóricos e experimentais da literatura, garantindo que a ferramenta reproduza adequadamente os processos físicos analisados (NETO et al., 2022). A motivação para a validação desses espectros de energia específicos encontra-se, principalmente, na recorrente utilização destes na radioterapia clínica convencional. Além disso, o simulador cúbico de água também foi escolhido por ser comumente utilizado na literatura e em processos dosimétricos (IAEA, 2001). Para isso, foi realizada uma comparação entre resultados simulados pelo TOPAS MC e resultados de referência de uma dosimetria de espectros de fótons de 6, 10 e 15 MV sobre uma caixa de água de 30 30 30 cm^2 (SHEIKH-BAGHERI; ROGERS, 2002). Os valores de dose, de acordo com a referência, foram normalizados pela dose na profundidade de 10 cm.

Para esta validação, o detector utilizado possuía as dimensões do simulador e foi dividido em 15 bins de 2 cm nos eixos x e y e 100 bins de 0,3 cm no eixo z. Os grá cos de PDP são obtidos plotando os valores de saída, em cada um dos bins no eixo central (Figura 20), em função da profundidade z (NETO et al., 2022).

Figura 20: Ilustração esquemática da irradiação do simulador no TOPAS MC (NETO et al., 2022).

Foram utilizadas 10^9 histórias para cada espectro a m de garantir uma curva de PDP com baixa utuação, conforme equação 2.18. A comparação dos espectros foi realizada pelo teste Z entre os valores de dose máxima normalizados pela dose depositada a 10 cm de profundidade numa caixa de água:

$$Z = \frac{jD^{T}_{max} \quad D^{R}_{max}j}{T} \tag{3.2}$$

Onde D^{T}_{max} é a dose máxima simulada pelo TOPAS MC, D^{R}_{max} é a dose máxima de referência, ambas normalizadas pela dose na profundidade de 10 cm, $_T$ é a incerteza associada ao valor simulado pelo TOPAS MC. Os valores comparados são compatíveis para Z 3. As simulações foram realizadas objetivando a média de dose depositada em cada um dos voxels do volume impingido, logo $_T$ foi calculada utilizando a equação 2.20.

3.1.2 Estatística

Para demonstrar a relação entre utuação estatística e o número de histórias, foram realizadas simulações do espectro de 6 MV sobre o simulador de 30 30 30 cm^3 com

3 diferentes valores de N_h: 1 milhão, 10 milhões e 1 bilhão.

3.1.3 Simulações didáticas

Para evidenciar a importância estatística entre simulações com parâmetros diferentes, foram realizadas simulações de irradiação de um simulador cúbico de água de dimensões 30 30 30 cm^3 utilizando o espectro de fótons de 6 MV com um campo 10 10 cm^2.

As simulações didáticas realizadas podem ser visualizadas na Tabela 2. Todos os arquivos de entrada estão disponíveis aos interessados para que possam ter liberdade de variar os parâmetros, ampliando a utilização da ferramenta e criando autonomia sobre o código. Além disso, também foi disponibilizado um breve resumo de instalação e ativação do código TOPAS MC, escrito pela colaboradora Larissa Grabriela Oliveira de Santana (2022). Todas as simulações foram implementadas com distância fonte superfície igual a 100 cm, com feixe incidindo em um objeto simulador de 3030 30 cm^3 e dose registrada em intervalos de profundidade de 0,3 cm para os meios homogêneos e um objeto simulador de 30 30 13 cm^3 e dose registrada em intervalos de profundidade de 0,1 cm para os meios heterogêneos. O módulo de física utilizado foi o padrão do código, de forma a facilitar o máximo possível a reprodução das simulações (PERL et al., 2012; FADDEGON et al., 2020).

Tabela 2: Simulações didáticas realizadas (NETO et al., 2022).

Radiação	Meio	Material	Energia	Campos (cm^2)
Fótons	Homogêneo	Água	6 e 15 MV	5 5 10 10 20 20
Fótons	Homogêneo	Água	6, 10 e 15 MV	10 10
Fótons	Heterogêneo	Água-Osso-Água*	15 MV	2 2
Fótons	Heterogêneo	Água-Pulmão-Água**	15 MV	2 2
Elétrons	Homogêneo	Água	6, 9, 12, 16, 20 e 24 MeV***	10 10

*O simulador foi composto por 3 placas (água-osso-água) medindo 5, 3 e 5 cm de espessura, respectivamente.

**O simulador foi composto por 3 placas (água-pulmão-água) medindo 5, 3 e 5 cm de espessura, respectivamente.

Para ambos os simuladores, as dimensões laterais de 30 30 cm^2 foram mantidas.

***Energia do feixe monoenergético de elétrons.

As simulações foram idealizadas objetivando estudar os efeitos:

- Tamanho de campo na curva de dose em profundidade;
- Energia do espectro na curva de dose em profundidade;
- Heterogeneidade e interfaces com grande diferença de densidade;
- Energia do feixe de elétrons na curva de dose em profundidade.

Para a obtenção de diversas curvas de dose em profundidade na água para elétrons, foram utilizadas as seguintes configurações: volume homogêneo de água de 30 30 30 cm^3 irradiado por feixes monoenergéticos de elétrons de 10^8 histórias com um campo 10 10 cm^2. Além disso, a curva de 16 MeV foi escolhida para ilustração de diversos parâmetros de alcance da partícula, tais como: alcance equivalente a 90% da dose máxima (R_{90}), alcance equivalente a 50% da dose máxima (R_{50}), alcance prático (R_p) e alcance máximo (veja 2.1.5) (R_{max}) (NETO et al., 2022).

A água foi utilizada como material do meio homogêneo. No código, o material foi con gurado para G4_WATER, da própria biblioteca do GEANT4. No caso do meio heterogêneo, mais dois materiais foram adicionados: osso cortical e pulmão.

Para o osso cortical, também da biblioteca do GEANT4, o material escolhido foi G4_BONE_CORTICAL_ICRP. Para o pulmão, foi veri cada a necessidade de, além de estabelecer como material G4_LUNG_ICRP, alterar a densidade do material, uma vez que a densidade padrão estabelecida é apenas do tecido pulmonar, sem considerar o ar. A densidade do pulmão foi estabelecida como 0,26 g/cm^3, que é a densidade empregada para pulmão in ado pelo documento report 44 da comissão internacional de unidades e medidas de radiação (ICRU, 1989; NETO et al., 2022).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As simulações foram executadas e seus dados de saída tratados de modo a evidenciar os aspectos físicos desejados para cada situação. Os dados de saída também estão disponíveis aos interessados que queiram fazer seus próprios grá cos ou comparar os resultados desse trabalho com os obtidos por suas próprias simulações (SANTANA, 2022).

Além do breve resumo de instalação e ativação do TOPAS MC, a colaboradora Larissa Gabriela Oliveira de Santana também desenvolveu um programa auxiliar em python (SANTANA, 2022) para auxiliar os docentes e alunos nas análises dos dados de saída obtidos nas simulações. O programa está com livre acesso. Foram utilizadas a versão 3.9.7, e suas bibliotecas pandas e matplotlib, versões 1.3.4 e 3.4.3, respectivamente. A biblioteca pandas permite a manipulação de dados e suas análises e a matplotlib nos fornece ferramentas para a visualização dos dados. Todo o processo feito até a visualização do grá co está documentado na própria aplicação desenvolvida (NETO et al., 2022).

4.1 Validação do código

A Figura 21 mostra os dados de validação do código TOPAS MC para os espectros de 6, 10 e 15 MV. Foram feitas sobreposições das curvas de PDP. As contínuas foram obtidas pelo tratamento dos dados de saída do TOPAS MC e, os triângulos alternados, são dados de referência (SHEIKH-BAGHERI; ROGERS, 2002).

A Figura 21 também mostra a concordância do comportamento das duas curvas para os espectros de 6 e 10 MV tanto para o build-up (região da curva da superfície até o ponto de dose máxima) quanto para o comportamento da curva em função da profundidade. A Tabela 3 apresenta a comparação quantitativa do valor de dose máxima normalizada pela dose depositada a 10 cm de profundidade do volume irradiado.

Figura 21: Validação do código para espectros de 6 (a), 10 (b) e 15 MV (c). O volume alvo simulado de 30 30 30 cm^3 de água foi dividido em 15bins em x, 15 bins em y e 120bins em z.

Tabela 3: Comparação entre os valores obtidos com o TOPAS MC e os valores de referência (SHEIKH-BAGHERI; ROGERS, 2002). O teste de compatibilidade foi realizado a partir da equação 3.2.

Espectro (MV)	D_{max} Referencial (%)	D_{max} Simulada (%)	Desvio Padrão (%)	Teste Z
6	1,52	1,526	0,002	3,00
10	1,36	1,362	0,001	2,00
15	1,31	1,307	0,001	2,54

A Figura 21 e os valores de Z da Tabela 3 garantem uma validação bem sucedida do TOPAS MC para este trabalho e a viabilidade da elaboração das simulações didáticas.

4.2 Estatística

A exploração da estatística das curvas em relação ao número de histórias proporcionou uma avaliação minuciosa da con abilidade e consistência dos resultados do TOPAS MC em diversas condições simuladas. A variabilidade nos resultados proporcionada pelos diferentes valores de histórias contribui para a compreensão mais aprofundada da sensibilidade do modelo de simulação. Esse enfoque permite uma análise minuciosa das oscilações e tendências nos dados gerados, promovendo esclarecimentos sobre a estabilidade e precisão do espectro de 6 MV simulado. Desta forma, a investigação dessas três con gurações