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

LAYS DOS SANTOS PINHEIRO

MODELO COMPUTACIONAL DE INTERAÇÃO DE RAIOS X PARA OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE MICROTOMOGRAFIA EM TECIDOS BIOLÓGICOS

RIO DE JANEIRO
2025

LAYS DOS SANTOS PINHEIRO

MODELO COMPUTACIONAL DE INTERAÇÃO DE RAIOS X PARA OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE MICROTOMOGRAFIA EM TECIDOS BIOLÓGICOS

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos para obtenção do grau de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Ricardo Tadeu Lopes

RIO DE JANEIRO
2025

LAYS DOS SANTOS PINHEIRO

MODELO COMPUTACIONAL DE INTERAÇÃO DE RAIOS X PARA OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE MICROTOMOGRAFIA EM TECIDOS BIOLÓGICOS

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos para obtenção do grau de Bacharel em Física Médica.

Aprovado em _5_ de _dezembro_____ de _2026___

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Ricardo Tadeu Lopes
COPPE/UFRJ

Átila Teles
IFPR

Prof. Bruno Mota
IF/UFRJ

Alguns caminhos são silenciosos e dedicados a quem soube respeitar meu tempo, oferecendo o amor, a dedicação e o apoio nos momentos certos. E, com todo meu amor, à peça deste quebra-cabeça, cuja presença transformou o esforço em propósito e a jornada em celebração.

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos à Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), que proporcionou o ambiente acadêmico e a infraestrutura necessários para a realização deste trabalho.

O reconhecimento primordial é dirigido ao Professor Doutor Ricardo Tadeu Lopes, pela inestimável orientação, paciência e por compartilhar seu vasto conhecimento, guiando-me com excelência técnica em todas as etapas desta pesquisa.

Igualmente importante é a gratidão expressa à equipe do LIN - Laboratório de Instrumentação Nuclear, pelo suporte técnico, pela disponibilização dos recursos essenciais e pela convivência enriquecedora durante o período de desenvolvimento do trabalho. Agradeço especialmente à colega Larissa Moura, pelo apoio e companheirismo nas horas de pesquisa.

Por fim, agradeço à minha família, pela base emocional, e àqueles que amo, por toda a compreensão e incentivo que me garantiram a tranquilidade para concluir esta jornada.

"If in physics there's something you don't understand,
you can always hide behind the uncharted depths of nature.
. . . But if your program doesn't work,
. . . you cannot hide behind an obstinate nature.
If it doesn't work, you've messed up."

Edsger W. Dijkstra

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento, a implementação e a validação de um modelo computacional híbrido para simular a atenuação de raios X em tecidos biológicos e biomateriais, com foco em aplicações de microtomografia computadorizada. O objetivo consiste em quantificar e comparar transmissão e contraste entre materiais, além de oferecer recursos práticos para otimização de protocolos de imagem. O método integra uma abordagem analítica, baseada na Lei de Beer–Lambert, e uma abordagem estocástica, fundamentada em simulações do tipo Monte Carlo, ambas acessadas por uma interface interativa construída em Python/Streamlit. O modelo utiliza coeficientes de atenuação de massa compilados do NIST/XCOM e gera espectros policromáticos por SpekPy ou, alternativamente, por um modelo TASMIP-like. O sistema calcula coeficientes dependentes da energia, mapas e curvas de isocontraste, e inclui um mecanismo de busca dos pares de materiais mais separáveis por métricas integradoras. Resultados demonstram consistência física e numérica, com comportamento energético coerente para água, tecidos moles, osso cortical e trabecular, esmalte, dentina e PMMA, além de evidências claras de endurecimento do feixe com filtração e espessura. A ferramenta exporta, opcionalmente, casos para Geant4 (geometrias e macros), facilitando estudos tridimensionais de transporte e dose. Conclui-se que o modelo cumpre função didática e de pesquisa, acelerando análises, favorecendo a reprodutibilidade e apoiando decisões sobre energia do feixe, filtração e espessura para maximização de contraste e redução de artefatos em microtomografia.

Palavras-chave: microtomografia computadorizada. atenuação de raios X. Lei de Beer-Lambert. simulação Monte Carlo. SpekPy. NIST XCOM. Geant4. contraste de imagem. otimização de protocolos. tecidos biológicos. biomateriais.

ABSTRACT

This work presents the development, implementation, and validation of a hybrid computational model designed to simulate X-ray attenuation in biological tissues and biomaterials, with a focus on micro-computed tomography (microCT) applications. The main objective is to quantify and compare transmission and contrast between materials while providing a practical tool for the optimization of imaging protocols. The proposed method combines an analytical approach, based on the Beer–Lambert Law, with a stochastic approach using Monte Carlo simulations, both integrated into an interactive interface developed in Python/Streamlit. The model employs mass attenuation coefficients obtained from the NIST/XCOM database and generates polychromatic spectra using SpekPy or a TASMIP-like model. It enables the calculation of energy-dependent attenuation coefficients, contrast maps, and isocontrast curves, as well as an automated search for the most distinguishable material pairs based on integrated contrast metrics. The results demonstrate physical and numerical consistency, with energy-dependent behavior coherent for water, soft tissue, cortical bone, trabecular bone, enamel, dentin, and PMMA, and with clear evidence of beam hardening due to filtration and material thickness. The tool also allows direct export of Geant4 simulation cases (geometry and macros), facilitating three-dimensional studies of radiation transport and absorbed dose. In conclusion, the proposed model fulfills both didactic and research purposes, enabling rapid, reproducible analysis and supporting decision-making on beam energy, filtration, and sample thickness to optimize contrast and reduce imaging artifacts in microCT.

Keywords: micro-computed tomography. X-ray attenuation. Beer-Lambert law. Monte Carlo simulation. SpekPy. NIST XCOM. Geant4. image contrast. protocol optimization. biological tissues. biomaterials.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Processo de Bremsstrahlung, responsável pela produção do espectro contínuo de raios X. Retirada de (EISBERG; RESNICK, 1979). 23
Figura 2 – Espectro típico de radiação de freamento (Bremsstrahlung), indicando a energia máxima ($E_{\text{máx}}$) e o comprimento de onda mínimo ($\lambda_{\text{mín}}$). . . 24
Figura 3 – Geração de raio X característico. O elétron incidente remove o elétron da camada K, e o elétron da camada L preenche a vacância, emitindo um fóton característico. 25
Figura 4 – Espectro de raios X emitidos por um tubo com alvo de Mo e por outro de W, sob 35 kV. 26
Figura 5 – Curvas de predominância dos processos de interação (fotoelétrico, Compton e produção de pares) em função da energia e do número atômico. . 28
Figura 6 – Cinemática do Efeito Fotoelétrico. 28
Figura 7 – Espalhamento Compton e momentos das partículas após o espalhamento. 29
Figura 8 – Produção de pares no campo de Coulomb de um núcleo atômico. . . . 30
Figura 9 – Arquitetura modular do software híbrido de simulação, integrando Python, Streamlit e Geant4. 35
Figura 10 – Interface gráfica: parâmetros de entrada e controle. 40
Figura 11 – Visualização de espectros e filtragens. 40
Figura 12 – Curvas de transmissão e comparação Analítico × MC. 40
Figura 13 – Exportação de resultados e relatório em PDF. 40
Figura 14 – Condição de filtragem: 0.0 mm de Alumínio e 80 kVp. 45
Figura 15 – Condição de filtragem: 1.5 mm de Alumínio e 80 kVp. 45
Figura 16 – Condição de filtragem: 2.10 mm de Alumínio e 105 kVp. 45
Figura 17 – Condição de filtragem: 2.10 mm de Alumínio mais 0.40 e 105 kVp. . . . 45
Figura 18 – Coeficiente de atenuação linear (μ) em função da energia para três tecidos: água, PMMA e tecido mole (dados NIST/XCOM). 46
Figura 19 – Curvas de transmissão I/I_0 em função da espessura para diferentes materiais (feixe monoenergético, 60 keV). 47
Figura 20 – Mapa de contraste ΔI (espessura × energia) entre água e tecido mole. 48
Figura 21 – Mapa de contraste ΔI (espessura × energia) entre tecido mole e osso cortical. 48
Figura 22 – Mapa de contraste ΔI (espessura × energia) entre tecido mole e PMMA. 48
Figura 23 – Mapa de contraste ΔI (espessura × energia) entre água e dentina. . . . 48
Figura 24 – Parâmetros científicos adicionais do material e da fonte de raios-X utilizados na simulação de interação com tecidos biológicos. 49
Figura 25 – Tabela de pares de materiais mais separáveis. 55

Figura 26 – QRCode Código fonte - Github 58

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AI	Artificial Intelligence
API	Application Programming Interface
CT	Computed Tomography
DB	Database
EPDL97	Evaluated Photon Data Library (1997)
ENDF/B	Evaluated Nuclear Data File (Series B)
FBP	Filtered Backprojection (Retroprojeção Filtrada)
GDML	Geometry Description Markup Language
G4	Geant4 – Geometry and Tracking Toolkit for the Simulation of the Passage of Particles through Matter
GUI	Graphical User Interface
ICRP	International Commission on Radiological Protection
ICRU	International Commission on Radiation Units and Measurements
MC	Monte Carlo (método estatístico de simulação)
MM	Mixed Material (material composto ou heterogêneo)
MTF	Modulation Transfer Function
NIST	National Institute of Standards and Technology
PET	Positron Emission Tomography
PMMA	Polimetilmetacrilato (Polymethyl Methacrylate)
Python	Linguagem de programação de alto nível utilizada para modelagem e análise
RPF	Retroprojeção Filtrada (Filtered Backprojection)
SNR	Signal-to-Noise Ratio

SpekPy	Python X-ray Spectrum Generator Library
Streamlit	Framework Python para criação de interfaces interativas de aplicações científicas
TASMIP	Tungsten Anode Spectra Model using Interpolating Polynomials (modelo empírico de espectro de raios X)
XCOM	NIST Photon Cross Sections Database

LISTA DE SÍMBOLOS

X	Raio X (radiação eletromagnética de alta energia)
μ	Coeficiente de atenuação linear [cm^{-1}]
μ/ρ	Coeficiente de atenuação de massa [cm^2/g]
I	Intensidade transmitida do feixe de raios X
I_0	Intensidade incidente do feixe de raios X
I/I_0	Fração de transmissão do feixe
x	Espessura do material atravessado [cm]
ΔI	Diferença de intensidade ou contraste relativo
Z	Número atômico
Z_{ef}	Número Atômico Efetivo (Effective Atomic Number)
ρ	Densidade do material [$\mathrm{g/cm}^3$]
E	Energia do fóton [keV]
$E_{\mathrm{máx}}$	Energia máxima do espectro de raios X [keV]
E_{ef}	Energia efetiva do feixe de raios X
λ	Comprimento de onda [m]
h	Constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J·s)
c	Velocidade da luz no vácuo (3×10^8 m/s)
e	Carga do elétron ($1,602 \times 10^{-19}$ C)
V	Potencial de aceleração (tensão do tubo) [kV]
kVp	Kilovolt Peak (tensão máxima do tubo de raios X)
ν	Frequência da radiação [Hz]
E_b	Energia de ligação do elétron [keV]
E_{cin}	Energia cinética do elétron ejetado [keV]
θ	Ângulo de espalhamento (Efeito Compton)

λ'	Comprimento de onda do fóton espalhado
m_e	Massa do elétron ($9,109 \times 10^{-31}$ kg)
γ	Fóton (radiação eletromagnética)
α, β, K, L, M	Camadas eletrônicas atômicas
P_{fe}	Probabilidade do Efeito Fotoelétrico
P_{C}	Probabilidade do Espalhamento Compton
P_{pp}	Probabilidade da Produção de Pares
m	Expoente de Mayneord usado no cálculo de Z_{ef}
K_α, K_β	Linhas características de emissão de raios X
$\phi(E)$	Fluência espectral de fótons por energia
$\bar{E}$	Energia média do espectro
$\Gamma(E)$	Distribuição espectral de fótons
I/I_0	Razão entre intensidades transmitida e incidente (Beer–Lambert)
η	Eficiência de emissão de fótons
σ	Seção de choque de interação
$\lambda_{\text{mín}}$	Comprimento de onda mínimo do espectro
E_i, E_f	Energias inicial e final do elétron no processo de freamento
t	Espessura ou trajetória percorrida [mm ou cm]
$N(E)$	Número de fótons por unidade de energia
E_{eff}	Energia efetiva ponderada por μ
N_0	Número inicial de fótons simulados
N_t	Número de fótons transmitidos
$f(E)$	Função de distribuição de energia
Φ	Fluência total (fótons/cm^2)
Ψ	Intensidade energética (energia/cm^2·s)
$GDML$	Formato padrão de geometria utilizado no Geant4

MC	Monte Carlo (método estatístico de simulação)
$G4$	Geant4 (plataforma de simulação física)
SNR	Relação sinal-ruído
MTF	Função de Transferência de Modulação
RPF	Retroprojeção Filtrada (algoritmo de reconstrução)
AI	Inteligência Artificial
CT	Tomografia Computadorizada
microCT	Microtomografia Computadorizada
XCOM	Banco de dados de coeficientes de atenuação (NIST)
SpekPy	Biblioteca Python para geração de espectros de raios X
TASMIP	Modelo de espectro de Tucker et al. (1991)
Beer–Lambert	Lei exponencial de atenuação de radiação
ΔI_{int}	Contraste integrado entre dois materiais
GDML	Formato XML para geometrias no Geant4
kVp	Quilovoltagem de pico
Al, Cu	Elementos filtrantes de alumínio e cobre
PMMA	Polimetilmetacrilato
H, C, O, N	Principais elementos de tecidos biológicos

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO . . . 17
1.1 DA DESCOBERTA DOS RAIOS X À PRECISÃO DO MICRÔMETRO: UMA TRAJETÓRIA NA IMAGIOLOGIA . . . 18
1.1.1 A Descoberta Fundamental e a Natureza da Radiação . . . 18
1.1.2 A Chegada da Tomografia Computadorizada (TC) . . . 18
1.1.3 O Salto para a Resolução Micrométrica com a microCT . . . 18
1.2 OBJETIVOS . . . 19
1.2.1 Objetivos Específicos . . . 19
1.3 RELEVÂNCIA E CONTRIBUIÇÕES DO ESTUDO . . . 19

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA . . . 21
2.1 PRODUÇÃO DE RAIOS X . . . 21
2.1.1 Radiação de Bremsstrahlung - Freamento . . . 22
2.1.1.1 Características do Espectro . . . 22
2.1.2 Raios X Característicos . . . 23
2.1.2.1 Mecanismo de Produção . . . 24
2.1.2.2 Espectro e Fatores de Dependência . . . 25
2.2 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA . . . 26
2.2.1 Efeito Fotoelétrico . . . 27
2.2.2 Efeito Compton . . . 29
2.2.3 Produção de Pares . . . 29
2.3 TÉCNICAS DE IMAGEM E SIMULAÇÃO . . . 30
2.3.1 Microtomografia Computadorizada: Funcionamento . . . 30
2.3.2 Simulação Monte Carlo (Geant4) . . . 31
2.4 APLICAÇÕES E DESAFIOS - MICROCT EM TECIDOS BIOLÓGICOS: DISCUSSÃO E NECESSIDADE DE CONTRASTES . . . 32
2.4.1 Correções físicas e artefatos em microCT . . . 32

3 METODOLOGIA COMPUTACIONAL . . . 34
3.1 ESTRUTURA DO MODELO COMPUTACIONAL HÍBRIDO . . . 34
3.1.1 Arquitetura do Software e Integração dos Módulos . . . 34
3.1.2 Modelo Analítico – Lei de Beer–Lambert e Aquisição de Dados de Referência . . . 36
3.1.2.0.1 Aquisição dos Coeficientes de Atenuação . . . 37
3.1.3 Modelo de Simulação Monte Carlo . . . 37
3.1.3.0.1 Configuração do ambiente de simulação . . . 37

3.1.3.0.2 Processos físicos considerados 37
3.1.4 Geração e Modelagem do Espectro de Raios X 38
3.2 DEFINIÇÃO DAS GEOMETRIAS E PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO 38
3.2.1 Geometrias Virtuais 38
3.2.2 Fonte de Raios X e Condições de Irradiação 38
3.3 FLUXO DE EXECUÇÃO DA SIMULAÇÃO 38
3.4 PROCESSAMENTO E ANÁLISE DOS DADOS 39
3.5 INTERFACE GRÁFICA INTERATIVA (GUI) 39
3.6 VALIDAÇÃO E ANÁLISE DE CONSISTÊNCIA 40
3.7 FLUXO COMPUTACIONAL INTEGRADO E REPRODUTIBILIDADE 40
3.8 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DOS MODELOS 41
3.8.1 Organização dos Códigos e Estrutura do Projeto 41
3.8.2 Integração com Bibliotecas e Ferramentas 41
3.8.3 Validação e Testes do Código 41
3.9 INTEGRAÇÃO ENTRE MODELOS E GERAÇÃO DE RESULTADOS 42
3.9.1 Fluxo de Integração Computacional 42
3.9.2 Visualização e Processamento dos Resultados 42
3.9.3 Correlação e Análise dos Desvios 42
3.9.4 Síntese da Integração Híbrida 43

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO 44
4.1 RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES 44
4.1.1 Espectro de Emissão e Filtragem 44
4.1.2 Coeficiente de Atenuação Linear (μ) 46
4.1.3 Curvas de Transmissão (I/I_0) 46
4.1.4 Mapas de Contraste (ΔI) 47
4.1.5 Propriedades Científicas Adicionais 49
4.1.6 Caracterização Específica do PMMA 50
4.1.7 Exportação Automática de Casos Geant4 50
4.1.8 Métricas Quantitativas de Desempenho 50
4.1.8.0.1 Meia-camada (HVL) e décima-camada (TVL). 50
4.1.8.0.2 Razão contraste-ruído (CNR) e SNR. 51
4.1.8.0.3 Erro BL×MC. 51
4.1.9 Incerteza Numérica e Convergência 51
4.2 DISCUSSÃO FÍSICA E IMPLICAÇÕES 52
4.3 SÍNTESE DOS RESULTADOS 52
4.4 LIMITAÇÕES E TRABALHOS FUTUROS 53
4.5 LINK GITHUB - CÓDIGO 53

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS 54

5.1 CONCLUSÕES DO MODELO HÍBRIDO 54
5.1.1 Consistência e Desempenho do Modelo 54
5.1.2 Otimização de Parâmetros e Ferramenta de Análise 55
5.2 LIMITAÇÕES E PERSPECTIVAS DE APRIMORAMENTO 55
5.2.1 Limitações do Trabalho 55
5.2.2 Perspectivas e Direções Futuras 56
5.3 SÍNTESE FINAL 57

REFERÊNCIAS 59

REFERÊNCIAS 59

1 INTRODUÇÃO

A descoberta dos raios X por WILHELM CONRAD ROENTGEN, em 1895, revolucionou a ciência e a medicina ao permitir a observação de estruturas internas de organismos vivos e materiais sem a necessidade de procedimentos invasivos. Desde então, essa radiação eletromagnética de alta energia passou a ser utilizada em diferentes áreas, com destaque para o diagnóstico por imagem, a pesquisa científica e aplicações industriais (ATTIX, 1986a; PODGORSAK, 2021; OKUNO, 2010).

A tomografia computadorizada (TC), desenvolvida na segunda metade do século XX, ampliou as possibilidades de visualização tridimensional por meio da reconstrução de cortes bidimensionais obtidos com raios X. Essa técnica consolidou-se como uma das principais ferramentas para a avaliação anatômica e clínica. A partir dela, emergiu a microtomografia computadorizada de raios X (microCT), que se baseia nos mesmos princípios, mas apresenta resolução micrométrica, permitindo a análise de detalhes estruturais com elevado grau de precisão (PENELOPE; WILLIAMS, 2017; MIZUTANI et al., 2008).

O uso da microCT se expandiu para diversas áreas da biomedicina, odontologia e engenharia de biomateriais, sendo empregada para o estudo de tecidos ósseos, dentários e moles, bem como para a caracterização de biomateriais implantáveis. Essa técnica permite não apenas a visualização qualitativa, mas também análises quantitativas, como mensuração de volumes, espessuras e densidades. Entretanto, a interpretação dos resultados e a otimização dos parâmetros de aquisição ainda representam desafios (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a).

A formação de imagens em microCT depende diretamente da diferença de absorção de raios X entre estruturas, fenômeno regido pela atenuação dos fótons ao atravessar os materiais. Embora a Lei de Beer–Lambert forneça um modelo inicial para descrever esse processo, ela não contempla a complexidade das interações físicas envolvidas, como o espalhamento Compton, o espalhamento coerente (Rayleigh) e a absorção fotoelétrica. Além disso, a policromaticidade dos feixes de raios X utilizados em microCT introduz artefatos e variações que não são previstos por modelos simplificados (ATTIX, 1986a; HUBBELL; SELTZER, 1995a; SELTZER, 1993a).

Nesse contexto, torna-se fundamental o desenvolvimento de modelos computacionais capazes de simular a interação dos raios X com tecidos biológicos de forma realista. Simulações pelo método de Monte Carlo, combinadas a modelos analíticos, oferecem um caminho promissor para compreender os fenômenos envolvidos, otimizar protocolos de aquisição e melhorar a acurácia na interpretação dos dados obtidos em microCT (DARTORA, 2017; BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017; PAKRAVAN et al., 2021).

1.1 DA DESCOBERTA DOS RAIOS X À PRECISÃO DO MICRÔMETRO: UMA TRAJETÓRIA NA IMAGIOLOGIA

A jornada representa a evolução das técnicas de imagem não invasivas, desde a descoberta da radiação eletromagnética até a capacidade de visualização das microestruturas internas na escala de micrômetros. A microCT é a culminação dessa trajetória, essencial para a física médica e a engenharia (PENELOPE; WILLIAMS, 2017; PODGORSAK, 2021).

1.1.1 A Descoberta Fundamental e a Natureza da Radiação

O marco inicial ocorreu em 1895 com a descoberta dos raios X por WILHELM CONRAD ROENTGEN. Enquanto realizava experimentos com tubos de raios catódicos, observou fluorescência inesperada em uma placa, descrevendo propriedades como invisibilidade ao olho humano, sensibilização de chapas fotográficas e luminescência em materiais fluorescentes. Concluiu que essa radiação não era luz visível nem raios catódicos, dada a ausência de desvio por ímãs e o poder de penetração superior. A aplicação inicial, radiografia, surgiu ao visualizar os ossos de sua própria mão. Posteriormente, a natureza ondulatória dos raios X foi evidenciada por difração (LAUE, 1912) e consolidou-se a dualidade onda–partícula (fóton). Em paralelo, os riscos da radiação motivaram a padronização de grandezas e a proteção radiológica, bases discutidas em textos de referência (ATTIX, 1986a; SHAPIRO, 2019; TAUHATA et al., 2014; CNEN, 2019).

1.1.2 A Chegada da Tomografia Computadorizada (TC)

Décadas após a descoberta dos raios X, a próxima grande inovação foi a TC, que combinou raios X e computação para gerar imagens seccionais do corpo, superando limitações das radiografias planas. O princípio envolve a aquisição de múltiplas projeções ao redor do objeto e a posterior reconstrução por algoritmos matemáticos (como a transformada de Radon e a retroprojeção filtrada). Do ponto de vista físico, a modelagem depende da atenuação exponencial dos fótons e das respostas do detector (PENELOPE; WILLIAMS, 2017; TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; BOONE; SEIBERT, 1997a).

1.1.3 O Salto para a Resolução Micrométrica com a microCT

A partir de avanços tecnológicos em fontes microfocais, detectores de alta resolução e geometrias de aquisição (incluindo feixe cônico), a microCT alcançou resoluções na ordem de micrômetros. Essa evolução possibilitou a reconstrução 3D detalhada da microestrutura de materiais e tecidos, com forte impacto em biomedicina e ciências dos materiais. O espectro do tubo (contínuo e linhas características) e o tamanho do ponto focal são determinantes para a nitidez e o ruído; modelos e medições espectrais clássicos

(Tucker–Barnes–Chakraborty; Boone–Seibert) são usados para sintetizar espectros realistas de 30–140 kV (TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; BOONE; SEIBERT, 1997a; HUBBELL; SELTZER, 1995a). Aplicações recentes incluem quantificação de porosidade, avaliação de microarquitetura óssea e estudos de transporte de água em solos altamente intemperizados (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a).

1.2 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo geral desenvolver um modelo computacional híbrido, combinando métodos analíticos e simulações Monte Carlo, para quantificar e comparar a absorção de raios X em diferentes tecidos biológicos e biomateriais, com a finalidade de otimizar parâmetros de aquisição em microCT e aprimorar a análise de dados.

1.2.1 Objetivos Específicos

- Compilar e organizar coeficientes de atenuação linear de tecidos biológicos (tecidos moles, osso cortical, osso trabecular, esmalte, dentina) e biomateriais relevantes em diferentes faixas de energia (HUBBELL; SELTZER, 1995a; SELTZER, 1993a).
- Implementar um modelo analítico baseado na Lei de Beer–Lambert para estimar a intensidade transmitida de raios X em cenários simplificados (ATTIX, 1986a).
- Desenvolver simulações Monte Carlo que representem a interação de fótons com geometrias tridimensionais, considerando absorção e espalhamento múltiplo (DARTORA, 2017; PAKRAVAN et al., 2021; BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017).
- Criar uma interface gráfica interativa (GUI) que permita manipulação dos parâmetros de simulação e visualização dinâmica dos resultados.
- Validar os modelos (analítico e Monte Carlo) comparando-os com dados experimentais da literatura e/ou exames de microCT disponíveis (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a).
- Elaborar relatórios automatizados contendo análises comparativas, gráficos e tabelas para apoiar a interpretação dos resultados.

1.3 RELEVÂNCIA E CONTRIBUIÇÕES DO ESTUDO

A microCT é uma das principais ferramentas para análise não destrutiva de tecidos biológicos e biomateriais, sendo amplamente utilizada em pesquisas biomédicas, odontológicas e em engenharia de materiais. No entanto, a interpretação quantitativa dos dados gerados ainda enfrenta limitações significativas, especialmente devido à complexidade da

interação dos raios X com diferentes tipos de tecidos e às restrições de modelos simplificados, como a Lei de Beer–Lambert. Além disso, protocolos de aquisição em microCT muitas vezes são definidos de forma empírica, sem considerar plenamente os efeitos de espalhamento, absorção múltipla e espectros policromáticos da fonte de radiação (ATTIX, 1986a; HUBBELL; SELTZER, 1995a).

Diante desse cenário, a presente pesquisa se torna relevante por propor o desenvolvimento de uma ferramenta computacional híbrida, capaz de integrar a eficiência dos modelos analíticos com a precisão das simulações Monte Carlo. Essa abordagem permitirá simulações mais realistas e detalhadas da interação de raios X com tecidos e biomateriais, oferecendo uma base quantitativa sólida para otimização de protocolos experimentais (DARTORA, 2017; PAKRAVAN et al., 2021).

Avanço científico: disponibilizar um modelo computacional que expanda o entendimento dos mecanismos de absorção e espalhamento de raios X em estruturas biológicas, contribuindo para a literatura da área (PODGORSAK, 2021; ATTIX, 1986a).

- **Aplicabilidade prática:** fornecer subsídios para otimizar parâmetros de aquisição em microCT, aumentando a qualidade das imagens obtidas e reduzindo a exposição desnecessária à radiação (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a).

- **Ferramenta de apoio à pesquisa:** disponibilizar uma interface interativa que facilite a exploração de diferentes cenários de simulação, tornando o modelo acessível a pesquisadores de diferentes áreas (DARTORA, 2017).

- **Validação experimental:** integrar dados da literatura e de exames de microCT para assegurar a confiabilidade dos resultados, fortalecendo o elo entre modelagem computacional e prática laboratorial (PESSOA et al., 2023a).

- **Base para estudos futuros:** abrir caminho para aplicações em geração de imagens sintéticas para inteligência artificial, investigação de artefatos de imagem e otimização de doses em protocolos de microCT (BOONE; SEIBERT, 1997a; TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; HUBBELL; SELTZER, 1995a).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Conforme afirmado por Wilhelm Conrad Roentgen, a descoberta dos raios X marcou uma nova era na ciência. Para compreender o impacto e a complexidade dessa radiação, é indispensável dominar a teoria que a fundamenta. Este capítulo, portanto, se dedica a apresentar o arcabouço teórico necessário para o desenvolvimento e a validação do modelo computacional proposto. Serão detalhados desde os mecanismos de interação dos fótons com a matéria até as grandezas que definem a proteção radiológica e a metodologia das simulações de Monte Carlo. (ATTIX, 1986a; PODGORSAK, 2021)

2.1 PRODUÇÃO DE RAIOS X

A descoberta dos raios X por Roentgen em 1895 não apenas inaugurou um novo campo de estudo, mas também lançou as bases para uma revolução no diagnóstico médico e na análise de materiais. Os raios X, nomeados com o prefixo 'X' para denotar sua natureza inicialmente desconhecida, são, em essência, uma forma de radiação eletromagnética, ocupando o espectro de alta energia e caracterizados por um comprimento de onda na faixa de 10^{-3} a 10 nm (ou 0,01 a 100 Å). Assim como a luz visível, essa radiação exibe propriedades ondulatórias como a difração, a interferência e a polarização, mas sua elevada energia permite interações com a matéria em um nível atômico (ATTIX, 1986a).

A emissão de radiação eletromagnética, incluindo os raios X, está intrinsecamente ligada a mudanças nos níveis de energia dos elétrons atômicos. Diferentemente das radiações nucleares (como alfa, beta e gama), que são provenientes de transições no núcleo, os raios X são gerados por meio de dois mecanismos primários que ocorrem fora do núcleo atômico, tipicamente em um tubo de raios X (OKUNO, 2010).

O primeiro processo é a radiação de freamento (bremsstrahlung), um termo alemão para "radiação de frenagem". Este fenômeno ocorre quando um elétron incidente de alta velocidade é desacelerado pelo campo coulombiano do núcleo do alvo, perdendo energia cinética que é convertida em um fóton de raio X. Como a perda de energia pode ocorrer em múltiplos estágios e com diferentes intensidades, a radiação de freamento produz um espectro de energia contínuo (PODGORSAK, 2021; TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; BOONE; SEIBERT, 1997a).

O segundo mecanismo, responsável pelo espectro de raios X característicos, envolve a remoção de um elétron da camada interna de um átomo do material alvo por um elétron incidente. Para preencher a vacância criada, um elétron de uma camada de energia superior decai para essa posição. A diferença de energia entre as camadas é então emitida como um fóton de raio X. Como as energias dos níveis eletrônicos são quantizadas e específicas para cada elemento, os fótons emitidos também possuem energias bem definidas,

resultando em um espectro de linhas discretas que é "característico"do material do alvo (ATTIX, 1986a).

Em um tubo de raios X, a maior parte da energia dos elétrons incidentes é convertida em calor devido às inúmeras colisões, o que torna imperativo que o material do alvo, como tungstênio (W) ou molibdênio (Mo), tenha um alto ponto de fusão. A análise desses espectros de energia, seja ele contínuo ou de linhas, é fundamental para o entendimento das propriedades dos feixes de radiação utilizados em técnicas de diagnóstico e análise.

2.1.1 Radiação de Bremsstrahlung - Freamento

A Radiação de Freamento (do alemão “Bremsstrahlung”, que significa “radiação de frenagem”) refere-se à emissão de fótons contínuos resultante da desaceleração de partículas carregadas leves - principalmente elétrons e pósitrons - ao interagir com o campo eletromagnético dos núcleos atômicos. Esse fenômeno constitui o principal mecanismo de produção de raios X contínuos em tubos de raios X e de radiação secundária em feixes de elétrons terapêuticos de alta energia. O Bremsstrahlung é um dos principais mecanismos de perda de energia por radiação para elétrons relativísticos (PODGORSAK, 2021; ATTIX, 1986a).

1. Interação clássica: segundo a teoria eletrodinâmica clássica, uma carga elétrica acelerada emite radiação. Ao penetrar num material, elétrons de alta energia sofrem deflexão no campo coulombiano de núcleos atômicos, sendo submetidos a uma aceleração (ou desaceleração) intensa.

2. Resultado da interação: essa variação de velocidade provoca a emissão de fótons de energia $h\nu$ que correspondem à diferença entre a energia cinética inicial e final do elétron:

$$E_i = E_f + h\nu \tag{2.1}$$

   A radiação de freamento é, portanto, um processo inelástico e contínuo, ocorrendo predominantemente em interações com núcleos, devido à sua carga elétrica elevada.

3. Direcionalidade: para elétrons de baixa energia, a emissão é quase isotrópica; já para energias relativísticas, os fótons são emitidos preferencialmente na direção do movimento do elétron (ATTIX, 1986a; PODGORSAK, 2021).

2.1.1.1 Características do Espectro

A radiação de freamento apresenta um espectro contínuo de energias, variando desde valores próximos de zero até a energia máxima do elétron incidente (E_0). Sendo a sua energia máxima dada por:

$$E_{mx} = eV \tag{2.2}$$

e seu comprimento de onda mínimo dado por:

$$\lambda_{mn} = \frac{hc}{eV} = \frac{1242}{E(eV)} nm \tag{2.3}$$

indicando que quanto maior a voltagem aplicada, menor será o comprimento de onda mínimo.

Assim, toda a energia cinética K do elétron ao atingir o alvo (OKUNO; YOSHIMURA, 2010), será dada pela relação conhecida como Lei de Duane e Hunt:

$$K(eletron) = eV = E_{\text{energia máx do fóton}} = h\nu_{mx} = \frac{hc}{\lambda_{mn}} \tag{2.4}$$

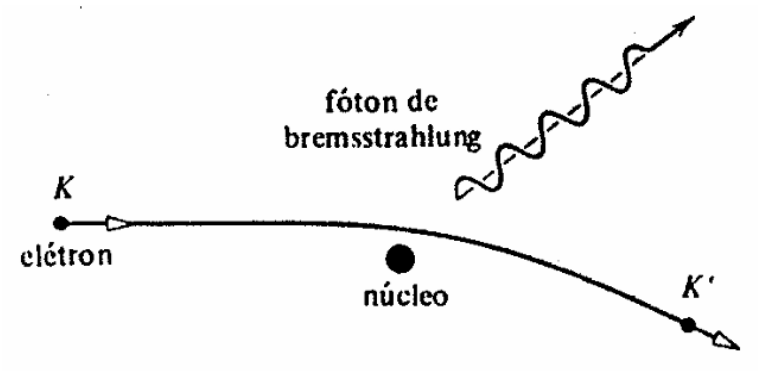

Figura 1 – Processo de Bremsstrahlung, responsável pela produção do espectro contínuo de raios X. Retirada de (EISBERG; RESNICK, 1979).

A energia máxima (E_{max}) dos fótons gerados é independente da natureza do material do alvo, sendo determinada exclusivamente pelo potencial de aceleração (V) aplicado ao tubo de raios X. O espectro contínuo de raios X, ilustrado na Figura 2 abaixo com um alvo de tungstênio sob diferentes potenciais, demonstra uma característica notável: para cada energia dos elétrons incidentes, há um comprimento de onda mínimo (λ_{min}) precisamente definido. A intensidade relativa expressa no espectro é diretamente proporcional à distribuição do número de fótons emitidos para cada faixa de energia (TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; BOONE; SEIBERT, 1997a).

2.1.2 Raios X Característicos

A emissão de Raios X Característicos constitui o segundo mecanismo fundamental de produção de radiação em um tubo de raios X, sendo uma assinatura energética única do material do alvo (ânodo). Diferentemente da radiação de freamento (Bremsstrahlung), que produz um espectro contínuo, os raios X característicos apresentam um espectro discreto, com energias específicas que dependem exclusivamente do número atômico (Z) do material do ânodo (ATTIX, 1986a).

Esses fótons são gerados a partir de transições eletrônicas internas no átomo, e suas energias refletem diretamente a estrutura eletrônica do elemento. O termo "característico"

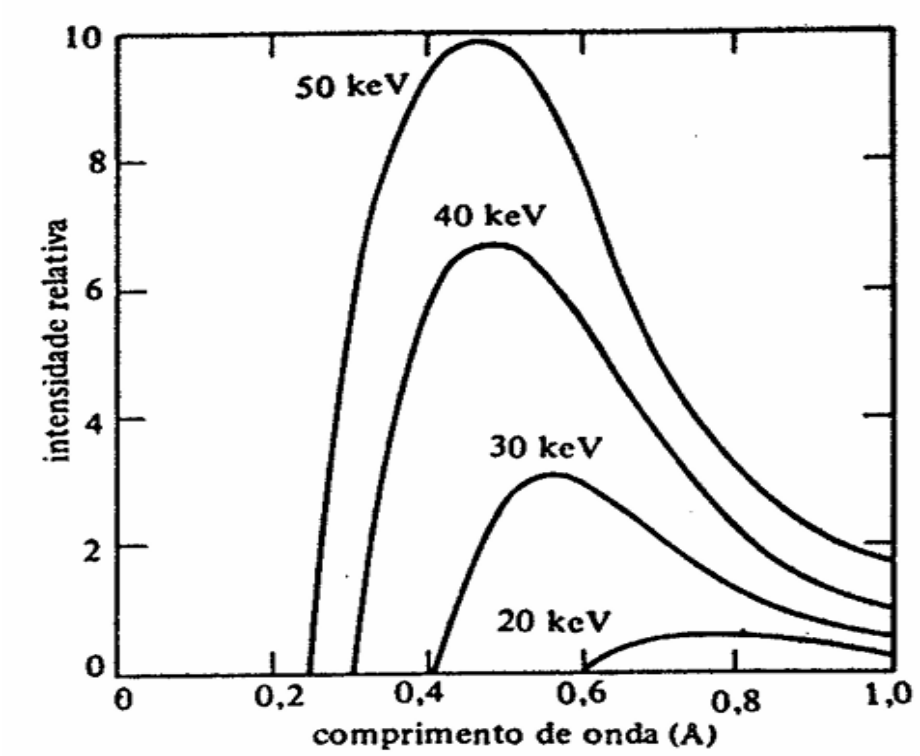

Figura 2 – Espectro típico de radiação de freamento (Bremsstrahlung), indicando a energia máxima ($E_{\text{máx}}$) e o comprimento de onda mínimo ($\lambda_{\text{mín}}$).

é utilizado porque cada elemento químico possui níveis de energia próprios, e, portanto, emite radiação X em energias que o identificam de forma única.

2.1.2.1 Mecanismo de Produção

O processo de emissão de raios X característicos ocorre quando um elétron incidente de alta energia colide com um átomo do ânodo, ejetando um elétron de uma camada eletrônica interna (tipicamente das camadas K ou L). Esse processo cria uma vacância eletrônica e deixa o átomo em um estado excitado e instável.

Para restaurar o equilíbrio, um elétron proveniente de uma camada mais externa (L, M, N, etc.) realiza uma transição para preencher a vacância. A diferença entre as energias de ligação das camadas envolvidas é liberada na forma de um fóton de raio X. Assim, a energia do fóton emitido é dada por:

$$E_{fton} = E_{\text{camada final}} - E_{\text{camada inicial}} \tag{2.5}$$

Cada transição corresponde a uma linha específica do espectro e apresenta uma energia bem definida. Como as energias de ligação dependem fortemente do número atômico, cada elemento gera um conjunto distinto de linhas, o que torna o espectro "característico" do material.

Um processo alternativo e concorrente pode ocorrer quando a energia liberada na transição não é emitida na forma de fóton, mas é transferida para outro elétron, que é então

ejetado do átomo. Esse elétron é chamado elétron Auger, e o fenômeno é conhecido como efeito Auger. Enquanto os elétrons Auger predominam em elementos leves, a emissão de fótons característicos é mais significativa em elementos de número atômico elevado.

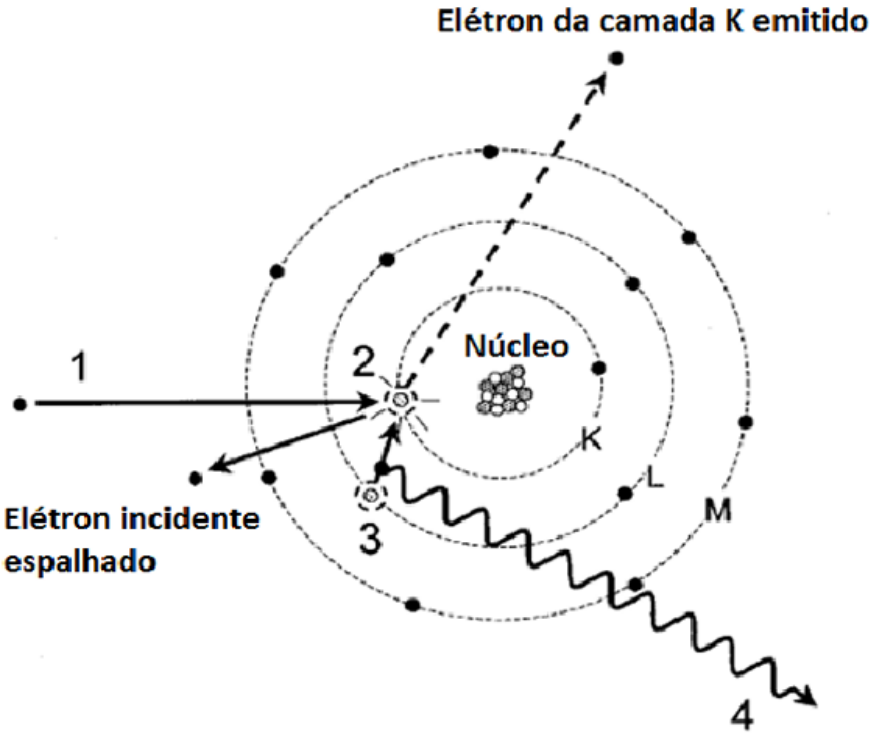

Figura 3 – Geração de raio X característico. O elétron incidente remove o elétron da camada K, e o elétron da camada L preenche a vacância, emitindo um fóton característico.

2.1.2.2 Espectro e Fatores de Dependência

O espectro característico aparece superposto ao espectro contínuo de freamento. A intensidade relativa e a energia das linhas características dependem de três fatores principais:

1. Número atômico do material do alvo (Z): quanto maior o Z, maior será a energia das linhas características, pois as energias de ligação dos elétrons internos aumentam com o número atômico. Por exemplo, para o molibdênio (Z = 42), as linhas K_α e K_β estão em aproximadamente 17,5 keV e 19,6 keV, respectivamente, enquanto para o tungstênio (Z = 74) atingem cerca de 59 keV e 67 keV.

2. Energia do feixe de elétrons incidente (kVp): a energia aplicada deve ser suficiente para ionizar a camada interna; abaixo desse limiar, não há produção de radiação característica.

3. Eficiência de emissão: apenas uma pequena fração da energia total dos elétrons é convertida em raios X característicos - tipicamente menos de 1% - mas, dentro da faixa de voltagens diagnósticas (80–150 kVp), essa radiação pode contribuir com até 10% da intensidade total do espectro.

Esses picos característicos são de extrema importância para a identificação de elementos e para a análise espectral de materiais, sendo amplamente utilizados em técnicas como espectroscopia de fluorescência de raios X (XRF) e microtomografia computadorizada (microCT).

A Figura 4 apresenta o espectro de comprimentos de onda dos raios X obtidos em um tubo, utilizando-se alvos de Tungstênio (W) e Molibdênio (Mo), sob um potencial acelerador de 35 kV. Observa-se que o espectro do alvo de Molibdênio consiste na superposição do espectro contínuo de Bremsstrahlung (radiação de frenagem) e do espectro de linhas de raios X característicos. Essas linhas, designadas como K_α e K_β, são visíveis como dois picos muito estreitos e intensos e resultam de transições eletrônicas específicas: o K_α é emitido pela transição de elétrons da camada L para a K, enquanto o K_β é gerado pela transição da camada M para a K. Por outro lado, o alvo de Tungstênio, com um potencial de excitação característico mais alto, exibe predominantemente apenas o espectro contínuo de Bremsstrahlung nesse potencial de 35 kV.

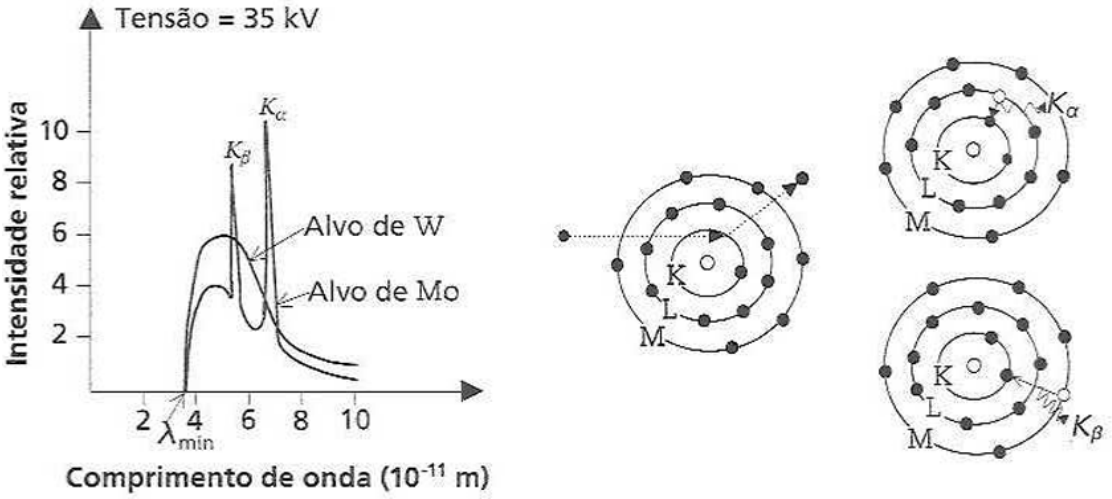

Figura 4 – Espectro de raios X emitidos por um tubo com alvo de Mo e por outro de W, sob 35 kV.

2.2 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

A interação dos raios X com a matéria é o princípio físico fundamental que rege a formação da imagem em microCT. Ao atravessar um meio, a radiação é submetida a processos de absorção e dispersão, resultando na atenuação do feixe (ATTIX, 1986a;

PODGORSAK, 2021). A magnitude dessa atenuação é o que permite distinguir diferentes estruturas (ossos, tecidos moles, agentes de contraste) e quantificar a densidade e a composição do material. Este processo é crucial tanto para a formação de imagens em radiologia quanto para a compreensão de como a radiação interage com diferentes tipos de tecidos e materiais.

Embora a atenuação total da radiação seja regida pela Lei de Beer-Lambert em condições ideais, a complexidade da interação em nível atômico reside na competição de múltiplos processos simultâneos. Os principais mecanismos de interação fóton-matéria na faixa de energia utilizada pela microCT (40 keV a 150 keV), excluindo as reações nucleares, são o Efeito Fotoelétrico, o Espalhamento Compton (Incoerente) e a Produção de Pares (HUBBELL; SELTZER, 1995a; SELTZER, 1993a). Estes mecanismos são fundamentais porque resultam na transferência da energia do fóton incidente para os elétrons atômicos do material.

A transferência de energia ocorre em duas etapas: inicialmente, o fóton interage com o átomo, transferindo sua energia para um ou mais elétrons; em seguida, esses elétrons ejetados (ou colocados em movimento) transmitem essa energia à matéria através de várias interações de força de Coulomb de curto alcance (geralmente de pequena magnitude) ao longo de seus trajetos. Essa energia depositada é o que caracteriza a Dose Absorvida (Kerma).

A importância relativa de cada um desses fenômenos é determinada pela energia do fóton incidente e pelo número atômico (Z) do meio absorvedor. O Efeito Fotoelétrico é o mecanismo de absorção que prevalece em baixas energias e em materiais de alto número atômico (Z), sendo o principal responsável pela produção de contraste em tecidos biológicos. O Espalhamento Compton torna-se dominante em energias intermediárias e para elementos de baixo Z, sendo a principal fonte de dispersão que pode degradar a qualidade da imagem tomográfica. Já o mecanismo de Produção de Pares ocorre apenas em energias muito altas ($> 1,022$ MeV) e é tipicamente desprezível na faixa de microCT. Esta dependência mútua é o pilar da simulação Monte Carlo e da interpretação do contraste em seu projeto.

2.2.1 Efeito Fotoelétrico

O Efeito Fotoelétrico é o processo no qual um fóton incidente é completamente absorvido por um elétron orbital do átomo, geralmente de uma camada interna (K, L ou M). A energia do fóton é utilizada para ejetar o elétron do átomo, resultando na formação de um íon positivo. A energia cinética do elétron ejetado, chamado fotoelétron, é dada por:

$$E_{cin} = h\nu - E_b \tag{2.6}$$

onde $h\nu$ é a energia do fóton incidente e E_b é a energia de ligação do elétron.

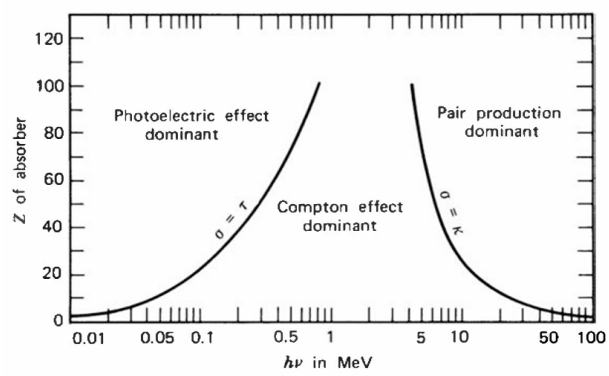

Figura 5 – Curvas de predominância dos processos de interação (fotoelétrico, Compton e produção de pares) em função da energia e do número atômico.

Esse processo ocorre com alta probabilidade em materiais de alto número atômico e em baixas energias de fóton, sendo predominante abaixo de aproximadamente 100 keV (ATTIX, 1986a). A probabilidade de ocorrência do efeito fotoelétrico é proporcional a:

$$P_{fe} = \quad \propto \frac{Z^3}{E^3} \tag{2.7}$$

o que explica por que o tungstênio (Z = 74) é tão eficiente na absorção e emissão de fótons nessa faixa de energia.

Após a ejeção do elétron, o átomo permanece ionizado e instável. Uma vacância é criada na camada interna, que será preenchida por um elétron de uma camada mais externa. Essa transição gera a emissão de raios X característicos ou elétrons Auger, conforme já descrito na seção anterior.

Do ponto de vista clínico, o efeito fotoelétrico é responsável pelo contraste das imagens radiográficas, já que tecidos de maior número atômico (como ossos, ricos em cálcio) absorvem mais fótons por esse mecanismo do que tecidos moles.

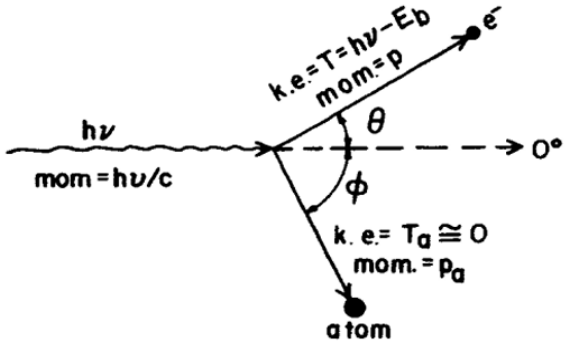

Figura 6 – Cinemática do Efeito Fotoelétrico.

2.2.2 Efeito Compton

O Efeito Compton consiste na colisão inelástica entre um fóton incidente e um elétron livre ou fracamente ligado do átomo. Durante o processo, parte da energia do fóton é transferida ao elétron, que é ejetado (chamado elétron de recuo), e o restante da energia é transportado por um novo fóton espalhado, de menor energia e direção alterada.

A conservação da energia e do momento linear define a relação entre o ângulo de espalhamento (θ) e o comprimento de onda do fóton espalhado (λ'):

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\theta) \tag{2.8}$$

onde $h/m_e c = 0,002430$ nm é o comprimento de onda Compton.

O Efeito Compton é o mecanismo dominante de interação para fótons com energias entre 100 keV e 10 MeV, típica das faixas utilizadas em radiodiagnóstico e radioterapia externa; e sua probabilidade de ocorrência depende aproximadamente da densidade eletrônica do material e varia de forma inversa com a energia do fóton (PODGORSAK, 2021; ATTIX, 1986a):

$$P_C \propto \frac{1}{E} \tag{2.9}$$

Por ser praticamente independente do número atômico, o espalhamento Compton ocorre tanto em tecidos moles quanto em ossos, reduzindo o contraste e contribuindo para a radiação secundária dispersa que degrada a qualidade da imagem.

Na prática clínica, o controle desse efeito é essencial. Técnicas como o uso de grades antiespalhamento, colimação do feixe e filtragem adequada ajudam a minimizar a quantidade de fótons espalhados que atingem o detector.

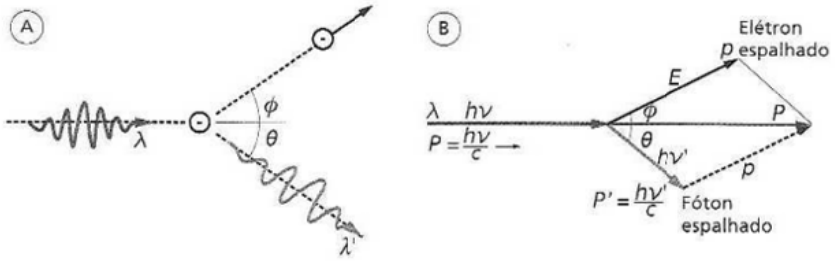

Figura 7 – Espalhamento Compton e momentos das partículas após o espalhamento.

2.2.3 Produção de Pares

A Produção de Pares é um processo que ocorre apenas quando o fóton possui energia superior a 1,022 MeV, equivalente a duas vezes a energia de repouso do elétron ($2m_e c^2$). Nesse fenômeno, o fóton interage com o campo elétrico do núcleo atômico e desaparece,

sendo convertida sua energia na criação de um par elétron-pósitron. A conservação da energia impõe que:

$$h\nu = 2m_e c^2 + E_{cin}(eltron) + E_{cin}(psitron) \tag{2.10}$$

onde $2m_e c^2 = 1,022MeV$ representa a energia mínica necessária para gerar o par.

A pós sua criação, o pósitron (antipartícula do elétron) rapidamente perde energia no meio e aniquila-se com um elétron, produzindo dois fótons de 511 keV emitidos em direções opostas - fenômeno fundamental para o princípio de funcionamento da Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET) (ATTIX, 1986a; PODGORSAK, 2021).

A probabilidade de ocorrência da produção de pares cresce com o número atômico e com a energia do fóton segundo:

$$P_{pp} \propto Z^2 ln(E) \tag{2.11}$$

Esse processo é irrelevante nas faixas de energia diagnóstica ($<$ 150 keV), mas torna-se importante em feixes de radioterapia (acima de 10 MeV) e em interações com núcleos de alto Z.

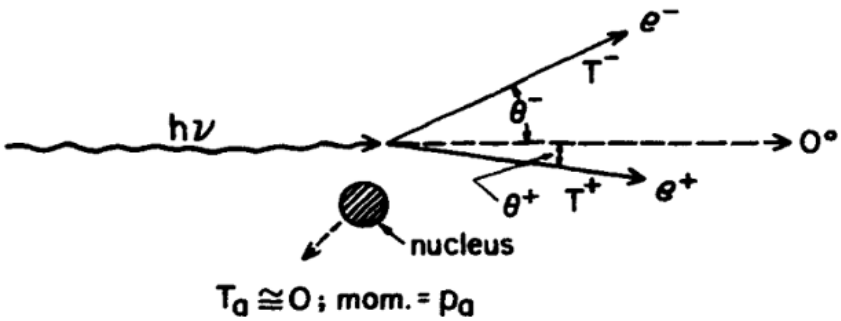

Figura 8 – Produção de pares no campo de Coulomb de um núcleo atômico.

2.3 TÉCNICAS DE IMAGEM E SIMULAÇÃO

2.3.1 Microtomografia Computadorizada: Funcionamento

A microCT é uma técnica de imagem tridimensional não destrutiva que utiliza raios X para obter imagens de alta resolução da estrutura interna de amostras biológicas e de materiais. Baseia-se na atenuação diferencial dos raios X ao atravessar regiões com diferentes densidades e composições, gerando contrastes que permitem distinguir e quantificar estruturas internas.

Durante a aquisição, a amostra é exposta a um feixe cônico de raios X enquanto realiza rotações angulares sucessivas, produzindo centenas ou milhares de projeções bidimensionais. Essas projeções são reconstruídas por algoritmos como a Transformada de Radon

e a retroprojeção filtrada (FBP), resultando em volumes tridimensionais detalhados. A reconstrução volumétrica viabiliza visualização, segmentação e quantificação sem cortes físicos ou preparo destrutivo da amostra.

Os equipamentos de microCT tipicamente incluem: (i) uma fonte microfocal de raios X; (ii) filtragem e colimação para modelar o feixe; (iii) uma plataforma rotacional de alta precisão; e (iv) um detector de cintilação de alta sensibilidade acoplado a câmera CCD ou CMOS. Essa configuração permite resoluções espaciais de alguns micrômetros até centenas de nanômetros, dependendo do tamanho do foco e da geometria de aquisição.

A técnica tem ampla aplicação em biologia, medicina, ciência dos materiais, arqueologia, geociências e engenharia. Em biomedicina, é empregada para investigar microarquitetura óssea, morfologia dentária, distribuição de biomateriais e avaliação de implantes. A capacidade de gerar modelos 3D com alta fidelidade geométrica a torna indispensável tanto em estudos *in vivo* (com doses reduzidas) quanto *ex vivo*, em amostras fixadas.

No contexto deste trabalho, a microCT é a técnica de imagem central, utilizada para correlacionar o comportamento físico dos fótons com a formação da imagem e validar modelos de simulação. Compreender em detalhe as interações da radiação com tecidos biológicos é essencial para otimizar energia do feixe, tempo de exposição e filtragem, assegurando qualidade e reprodutibilidade. A modelagem computacional proposta busca reproduzir e analisar a atenuação dos raios X de forma realista, permitindo prever o comportamento da radiação em diferentes tecidos e apoiar a interpretação quantitativa dos resultados. (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a)

2.3.2 Simulação Monte Carlo (Geant4)

O Geant4 é uma plataforma de simulação baseada no método de Monte Carlo, desenvolvida e mantida pelo CERN, amplamente utilizada para modelar a interação de partículas com a matéria. Essa ferramenta de código aberto permite rastrear a trajetória de partículas subatômicas - como elétrons, fótons e nêutrons - enquanto sofrem processos de espalhamento, absorção e produção de radiação secundária em geometrias e materiais diversos.

A simulação Monte Carlo gera eventos aleatórios que representam as possíveis interações entre partículas e átomos de acordo com distribuições probabilísticas fundamentadas em dados experimentais e modelos teóricos. A análise estatística de um grande número de eventos fornece estimativas realistas de deposição de energia, atenuação, dose absorvida e transporte de partículas.

Entre as vantagens do Geant4 estão a flexibilidade geométrica (de camadas planas e cilindros a anatomias complexas obtidas por imagem), a possibilidade de especificar composições químicas e densidades e a disponibilidade de modelos físicos validados. Isso o torna particularmente útil em Física Médica para cálculo de dose, otimização de detectores e análise de espalhamento e ruído em imagens de raios X.

Em medicina nuclear e radiodiagnóstico, o Geant4 (isoladamente ou via GATE) é empregado em dosimetria interna/externa, planejamento e validação de protocolos de imagem. Neste trabalho, ele será utilizado para modelar o feixe policromático de raios X de um microtomógrafo e sua interação com tecidos biológicos de diferentes densidades e composições. A simulação permitirá quantificar atenuação e espalhamento considerando fenômenos como efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e, quando pertinente, produção de pares - aspectos não totalmente capturados por modelos analíticos simplificados, como a Lei de Beer–Lambert. Espera-se, assim, obter um modelo Monte Carlo validado experimentalmente, capaz de reproduzir o comportamento real do feixe e contribuir para a otimização de protocolos de aquisição em microCT. (DARTORA, 2017; BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017; PAKRAVAN et al., 2021)

2.4 APLICAÇÕES E DESAFIOS - MICROCT EM TECIDOS BIOLÓGICOS: DISCUSSÃO E NECESSIDADE DE CONTRASTES

Embora a microCT ofereça altíssima resolução espacial, o contraste intrínseco em tecidos biológicos moles é limitado, pois esses tecidos possuem composições e densidades semelhantes. Assim, o contraste é dominado por diferenças sutis de densidade ou pela presença de elementos de alto número atômico (Z), como cálcio.

Para superar essa limitação, recorrem-se a agentes de contraste contendo elementos de alto Z (por exemplo, iodo, bário, ouro ou gadolínio), que aumentam a probabilidade de absorção fotoelétrica e ampliam a diferença de atenuação entre tecidos. Em microCT, soluções como Lugol (iodo em iodeto de potássio) e fosfato de tungstato são usadas para realçar vasos, músculos e órgãos parenquimatosos. A difusão do contraste e o tempo de impregnação afetam diretamente a uniformidade e a qualidade da imagem, e, em estudos *in vivo*, devem-se considerar toxicidade, osmolaridade e impacto na dose.

Entender os mecanismos de interação dos fótons com tecidos e contrastes é crucial para interpretar corretamente as imagens. A combinação entre modelagem computacional (Geant4) e dados experimentais de microCT permite avaliar quantitativamente o efeito dos agentes, otimizar condições de aquisição e reduzir artefatos como *beam hardening* e espalhamento incoerente, melhorando tanto a qualidade visual quanto a fidelidade quantitativa das medidas. (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a)

2.4.1 Correções físicas e artefatos em microCT

As imagens reconstruídas frequentemente apresentam artefatos decorrentes da policromaticidade do feixe, da resposta do detector, do espalhamento múltiplo e de ruídos (Poisson e eletrônico). Entre os mais comuns estão o endurecimento do feixe (*beam hardening*), halos em torno de regiões de alto Z, perda de contraste por espalhamento incoerente e padrões de ruído.

Modelos de simulação com Geant4 auxiliam a reproduzir e quantificar esses efeitos, permitindo projetar correções físicas e matemáticas: inclusão de espectros policromáticos realistas, modelagem da resposta do detector, estimativa da fração de fótons espalhados e calibração de algoritmos de reconstrução corrigidos. O estudo e a mitigação sistemática desses artefatos são essenciais para assegurar a confiabilidade de medidas quantitativas (densidade, porosidade) em aplicações biomédicas e de materiais.

3 METODOLOGIA COMPUTACIONAL

O presente capítulo descreve a metodologia adotada para o desenvolvimento do modelo computacional híbrido destinado à estimativa e comparação da atenuação de raios X em tecidos biológicos e biomateriais. O estudo foi conduzido de forma inteiramente teórica e computacional, sem aquisição experimental de imagens, utilizando-se dados de referência de bancos oficiais (NIST/XCOM) e simulações Monte Carlo realizadas em ambiente de software especializado (DARTORA, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021; BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017).

O modelo proposto integra duas abordagens complementares: um modelo analítico determinístico, baseado na Lei de Beer–Lambert, e um modelo estocástico fundamentado na simulação Monte Carlo. Essa combinação permite explorar tanto a precisão física das interações quanto a eficiência computacional dos cálculos, resultando em um sistema robusto para estudos de atenuação em feixes policromáticos e geometrias heterogêneas típicas da microCT (MIZUTANI; SUZUKI, 2008; PESSOA et al., 2023b).

3.1 ESTRUTURA DO MODELO COMPUTACIONAL HÍBRIDO

O modelo híbrido combina a rapidez do cálculo analítico com a precisão estatística da simulação Monte Carlo para descrever a interação de fótons com diferentes meios materiais (ATTIX, 1986a; OKUNO, 2010; DARTORA, 2017). Essa integração permite quantificar o comportamento dos raios X em condições reais, considerando não apenas a absorção, mas também o espalhamento e o endurecimento espectral do feixe (BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021).

1. **Modelo Analítico**: fundamentado na Lei de Beer–Lambert, fornece estimativas ideais de atenuação em meios homogêneos e monoenergéticos;

2. **Modelo Estocástico (Monte Carlo)**: simula o transporte e a interação de fótons em geometrias tridimensionais e espectros policromáticos, incorporando processos físicos reais.

A comparação entre ambos possibilita identificar discrepâncias decorrentes de efeitos não lineares e fornecer subsídios para correções físicas aplicáveis à microCT (MIZUTANI; SUZUKI, 2008; PESSOA et al., 2023b).

3.1.1 Arquitetura do Software e Integração dos Módulos

O sistema computacional foi implementado em arquitetura modular composta por três camadas principais:

1. **Camada Física (Core Engine)**: implementada em Python e C++, responsável pelos cálculos de atenuação e pela execução das simulações Monte Carlo via Geant4.

2. **Camada de Processamento e Análise**: utiliza as bibliotecas NumPy, Pandas e SciPy para tratamento dos dados e interpolação dos coeficientes de atenuação, bem como Matplotlib e Plotly para geração de gráficos.

3. **Camada de Interface (GUI)**: desenvolvida em Streamlit, fornece uma interface interativa que permite ao usuário definir parâmetros experimentais, visualizar resultados em tempo real e comparar curvas analíticas e simuladas.

O fluxo de dados entre as camadas ocorre por meio de dataframes temporários e APIs locais, garantindo modularidade e expansibilidade. Essa estrutura, mostrada na Figura 9, permite futuras integrações com bancos experimentais e algoritmos de aprendizado de máquina.

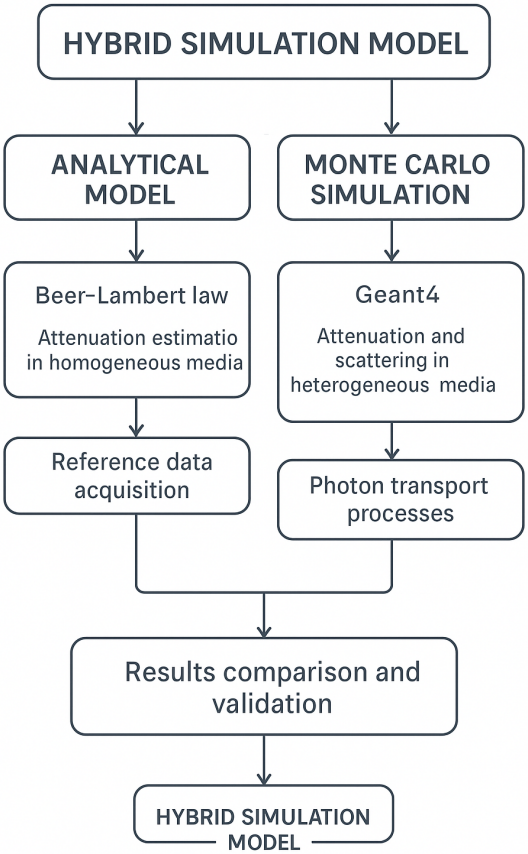

Figura 9 – Arquitetura modular do software híbrido de simulação, integrando Python, Streamlit e Geant4.

3.1.2 Modelo Analítico – Lei de Beer–Lambert e Aquisição de Dados de Referência

A Lei de Beer-Lambert descreve como a intensidade de um feixe de raios-X diminui à medida que atravessa um material homogêneo, devido à absorção e espalhamento da radiação. A equação que representa essa lei é dada por:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \tag{3.1}$$

onde:

- I_0 é a intensidade inicial do feixe de raios-X antes de atravessar o material,
- I é a intensidade transmitida após a interação com o material,
- μ é o coeficiente de atenuação linear do material (medido em cm^{-1}), que depende da composição e da densidade do material, bem como da energia dos fótons incidentes,
- x é a espessura do material atravessado (em centímetros).

A Lei de Beer-Lambert sugere que a redução na intensidade do feixe é exponencial em função da espessura do material e do coeficiente de atenuação. Este modelo simplificado é ideal para situações onde a interação entre os fótons e o material ocorre principalmente por absorção, sem levar em consideração fenômenos mais complexos, como o espalhamento múltiplo ou a dispersão de fótons, que também afetam a intensidade transmitida.

Dedução da Lei de Beer-Lambert

A dedução da Lei de Beer-Lambert parte de uma consideração simples sobre a atenuação de um feixe de radiação ao passar através de um material. Considerando que a absorção de radiação seja proporcional à intensidade do feixe e à espessura do material, temos:

$$\frac{dI}{dx} = -\mu I$$

Aqui, dI é a mudança na intensidade I ao percorrer um pequeno intervalo dx no material, e μ é o coeficiente de atenuação linear, que quantifica a probabilidade de absorção por unidade de comprimento.

Essa equação diferencial pode ser resolvida para encontrar a intensidade do feixe I em função da espessura x, resultando na equação 3.1.

Embora a Lei de Beer-Lambert seja extremamente útil, ela possui limitações quando aplicada a materiais heterogêneos, geometrias complexas ou fontes de radiação policromáticas, situações frequentemente encontradas em microtomografia. Para esses casos, modelos mais avançados, como simulações de Monte Carlo, são empregados para uma modelagem mais precisa da interação de raios-X.

3.1.2.0.1 Aquisição dos Coeficientes de Atenuação

Dada a natureza teórica deste trabalho, a aquisição dos **coeficientes de atenuação de massa** (μ/ρ) para os materiais de interesse - tecidos moles, osso cortical e trabecular, esmalte, dentina e biomateriais - foi realizada por meio de consulta ao banco de dados **XCOM** do **National Institute of Standards and Technology (NIST)** e a artigos de referência da literatura clássica (HUBBELL; SELTZER, 1995b; SELTZER, 1993a). Essa abordagem garante a acurácia dos dados de entrada, que constituem o pilar da simulação.

Os dados compilados foram organizados em matrizes e utilizados para:

1. Calcular o **coeficiente de atenuação linear** (μ) para cada material, multiplicando o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) pela densidade de referência (ρ), conforme a Equação 3.2:
$$\mu = \left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho \tag{3.2}$$
2. Aplicar **interpolação linear** (via `SciPy`) para estimar valores de μ em energias que não constam nas tabelas de referência originais, garantindo continuidade e precisão nos cálculos de atenuação.

3.1.3 Modelo de Simulação Monte Carlo

A etapa estocástica foi realizada utilizando o código **Geant4** (ou, alternativamente, o **MCNP**, conforme disponibilidade computacional), ambos amplamente empregados para modelagem de transporte de fótons em física médica (DARTORA, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021).

3.1.3.0.1 Configuração do ambiente de simulação

O ambiente foi parametrizado para replicar condições típicas de **microCT de feixe cônico**, considerando:

- fonte de raios X isotrópica com espectro policromático (gerado via `SpekCalc`/`TASMIP`);
- energias entre 40 e 100 keV, correspondentes a microCT pré-clínico;
- amostras homogêneas e multicamadas representando tecidos e biomateriais de interesse.

3.1.3.0.2 Processos físicos considerados

Os seguintes processos de interação foram ativados: (i) efeito fotoelétrico; (ii) espalhamento Compton (incoerente); e (iii) espalhamento Rayleigh (coerente). As seções de choque foram obtidas a partir de bibliotecas físicas padrão do Geant4, consistentes com *EPDL97/ENDF/B*.

3.1.4 Geração e Modelagem do Espectro de Raios X

O espectro policromático utilizado nas simulações foi gerado com `SpekCalc/TASMIP`, baseados nas formulações de Tucker et al. (TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991) e Boone & Seibert (BOONE; SEIBERT, 1997a). Os espectros foram ajustados para 40–100 kVp, com filtrações equivalentes de 1–2 mm Al e 0,1 mm Cu, representativas de microCT pré-clínico.

Cada espectro foi normalizado e discretizado em intervalos de 0,5 keV, sendo convertido em uma distribuição de probabilidade energética para amostragem dos fótons no Geant4, assegurando a reprodução realista do feixe policromático de microtomógrafos comerciais.

3.2 DEFINIÇÃO DAS GEOMETRIAS E PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO

3.2.1 Geometrias Virtuais

Foram definidas duas categorias de fantomas:

- **Fantoma simples**: blocos homogêneos de água, osso cortical, dentina e biomateriais para comparação direta com a Lei de Beer–Lambert;
- **Fantoma multicamadas**: estruturas compostas alternando tecidos moles e ossos, para avaliar atenuação em interfaces e efeitos de *beam hardening*.

As composições e densidades foram adotadas de documentos de referência e de estudos experimentais de microCT (PESSOA et al., 2023b).

3.2.2 Fonte de Raios X e Condições de Irradiação

- Tensão do tubo: 40–100 kVp;
- Filtração: 1–2 mm Al e 0,1 mm Cu;
- Geometria: feixe cônico com distância fonte–detector de 20 cm;
- Histórias simuladas: 10^7 fótons por execução.

Critérios de convergência foram definidos para garantir erro estatístico $< 2\%$ nas grandezas estimadas.

3.3 FLUXO DE EXECUÇÃO DA SIMULAÇÃO

O processo completo de cálculo e análise foi dividido nas etapas abaixo:

1. seleção do material e parâmetros geométricos;
2. cálculo analítico de atenuação via Beer–Lambert;

3. geração do espectro policromático com SpekCalc/TASMIP;
4. definição da geometria do fantoma no Geant4;
5. transporte de 10^7 fótons com registro de absorção, espalhamento e transmissão;
6. exportação dos resultados em `.csv`;
7. processamento e análise em Python;
8. visualização interativa dos resultados via Streamlit.

3.4 PROCESSAMENTO E ANÁLISE DOS DADOS

Os resultados das simulações foram exportados em `.csv` e processados em Python. As análises incluíram:

- comparação entre o modelo analítico e o modelo Monte Carlo;
- cálculo da atenuação relativa e contraste entre materiais;
- avaliação da distribuição espacial da energia depositada (dose absorvida);
- análise da fração de espalhamento detectada.

As visualizações foram geradas com `Matplotlib` e `Plotly`, permitindo análise da relação entre energia, espessura e intensidade transmitida.

3.5 INTERFACE GRÁFICA INTERATIVA (GUI)

Uma interface interativa foi desenvolvida em Streamlit, integrando as funcionalidades analíticas e simuladas. O ambiente permite:

- selecionar material, espessura e energia;
- comparar curvas analíticas e Monte Carlo em tempo real;
- visualizar o espectro policromático, contraste e intensidade transmitida.

A GUI também exporta relatórios em PDF com gráficos e parâmetros utilizados, apoiando pesquisa e ensino de Física das Radiações.

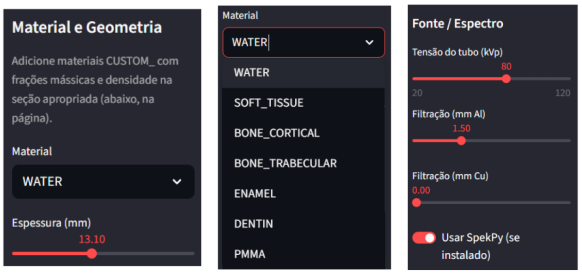

Figura 10 – Interface gráfica: parâmetros de entrada e controle.

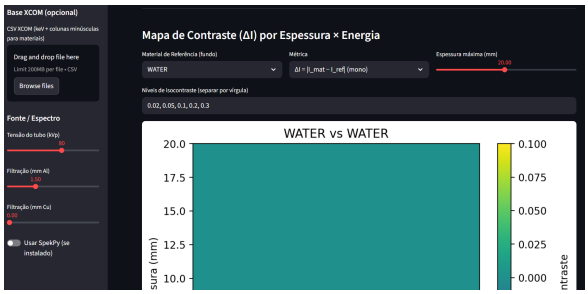

Figura 11 – Visualização de espectros e filtragens.

Figura 12 – Curvas de transmissão e comparação Analítico × MC.

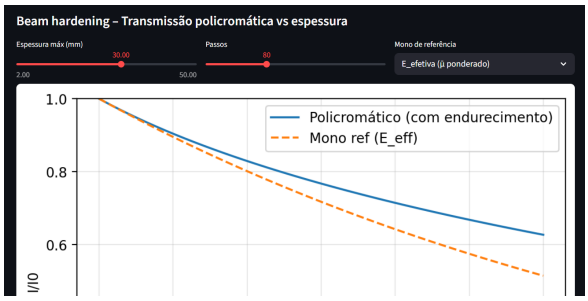

Figura 13 – Exportação de resultados e relatório em PDF.

3.6 VALIDAÇÃO E ANÁLISE DE CONSISTÊNCIA

A validação do modelo foi conduzida por comparação com dados de referência e resultados da literatura:

1. **Consistência interna**: comparação entre Beer–Lambert e Monte Carlo sob condições homogêneas e (quase) monoenergéticas;

2. **Validação externa**: comparação com coeficientes do NIST/XCOM e com resultados publicados (HUBBELL; SELTZER, 1995b; SELTZER, 1993a; BOONE; MCNITT-GRAY; HERNANDEZ, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021; PESSOA et al., 2023b);

3. **Incerteza**: combinação quadrática do erro estatístico das simulações com as incertezas das propriedades físicas dos materiais.

3.7 FLUXO COMPUTACIONAL INTEGRADO E REPRODUTIBILIDADE

Para garantir reprodutibilidade, todo o código foi versionado em Git (repositório privado), contendo scripts, arquivos de configuração e parâmetros físicos. Cada simulação registra metadados: data/hora, número de histórias, energia máxima e filtragem do feixe, semente aleatória, módulos físicos ativados, dados de saída e estatísticas de incerteza.

3.8 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DOS MODELOS

A implementação do modelo híbrido foi desenvolvida integralmente em **Python** (3.13.9), com integração ao **Geant4** por meio de scripts e macros dedicadas.

3.8.1 Organização dos Códigos e Estrutura do Projeto

- `attenuation.py` - Cálculo analítico de atenuação (Beer–Lambert) (ATTIX, 1986a; OKUNO, 2010), usando coeficientes XCOM/NIST (HUBBELL; SELTZER, 1995b; SELTZER, 1993a);
- `spectrum.py` - Geração/manipulação de espectros policromáticos (tungstênio) com `SpekPy`, implementando Boone & Seibert (BOONE; SEIBERT, 1997a);
- `montecarlo.g4macro` - Simulação no **Geant4** (transporte de fótons em geometrias 3D) (DARTORA, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021);
- `app_streamlit.py` - GUI em **Streamlit** para execução interativa e comparação Analítico $\times$ MC.

A comunicação entre módulos usa arquivos `.csv`/`.json`, facilitando controle de variáveis e integração.

3.8.2 Integração com Bibliotecas e Ferramentas

- **NumPy**, **Pandas** - operações vetoriais/estruturas tabulares;
- **SciPy** - interpolação e ajustes;
- **Matplotlib**/**Plotly** - gráficos de transmissão, espectros e comparativos;
- **SpekPy** - espectros policromáticos (ânodo W; filtros Al/Cu) (BOONE; SEIBERT, 1997a);
- **Geant4** - transporte/interações (fotoelétrico, Compton, Rayleigh) (DARTORA, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021);
- **Streamlit** - interface e comparação em tempo real.

3.8.3 Validação e Testes do Código

1. **Coeficientes de atenuação**: concordância com XCOM/NIST (HUBBELL; SELTZER, 1995b; SELTZER, 1993a) (desvios típicos $< 2\%$ na faixa 30–120 keV);
2. **Consistência espectral**: espectros de `SpekPy` compatíveis com Boone & Seibert (BOONE; SEIBERT, 1997a);

3. **Validação cruzada**: tendências de transmissão de MC reproduzindo Beer–Lambert em meios homogêneos, com divergência crescente em feixes policromáticos/espessuras maiores (ATTIX, 1986a; DARTORA, 2017).

3.9 INTEGRAÇÃO ENTRE MODELOS E GERAÇÃO DE RESULTADOS

A integração permite comparar diretamente a abordagem analítica e os resultados de Monte Carlo, explorando as vantagens de ambas - eficiência da Beer–Lambert e realismo físico do Geant4.

3.9.1 Fluxo de Integração Computacional

1. **Cálculo analítico**: `attenuation.py` computa I/I_0 (Beer–Lambert) (ATTIX, 1986a; OKUNO, 2010) com μ derivados de XCOM/NIST (HUBBELL; SELTZER, 1995b; SELTZER, 1993a);

2. **Simulação MC**: `montecarlo.g4macro` executa o transporte estocástico no Geant4 (DARTORA, 2017; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021);

3. **Comparação**: `app_streamlit.py` gera curvas e erro relativo entre modelos.

Parâmetros (espessura, densidade, energia média, composição e filtragem) podem ser ajustados dinamicamente na GUI.

3.9.2 Visualização e Processamento dos Resultados

1. **Curvas I/I_0 vs. espessura**: verificação da tendência exponencial e identificação de desvios por policromaticidade/espalhamento (ATTIX, 1986a; TAUHATA et al., 2014);

2. **Espectro pós-filtragem**: endurecimento do feixe e energia média transmitida (BOONE; SEIBERT, 1997a);

3. **Analítico $\times$ MC**: sobreposição de curvas e intervalos de incerteza (número de histórias no Geant4).

As visualizações usam `Matplotlib` e `Seaborn`; estatística: média, desvio padrão e erro relativo, conforme (DARTORA, 2017) e diretrizes didáticas de (ATTIX, 1986a).

3.9.3 Correlação e Análise dos Desvios

Desvios entre as curvas foram atribuídos principalmente a:

- **Endurecimento do feixe**: feixe policromático reduz a taxa média de atenuação;

- **Espalhamento Compton/retroespalhamento**: perdas aparentes de intensidade no campo direto do detector (ATTIX, 1986a; YOSHIMURA, 2015);
- **Heterogeneidade do meio**: variações locais de densidade/composição, consideradas no MC e ausentes no modelo determinístico.

Para feixes (quase) monoenergéticos e meios homogêneos, a concordância típica é $> 98\%$. Em feixes policromáticos e maiores espessuras, observa-se desvio crescente, consistente com (BOONE; SEIBERT, 1997a; PAKRAVAN; GHAHREMAN; SHAFIEE, 2021).

3.9.4 Síntese da Integração Híbrida

A abordagem híbrida descreve a atenuação de feixes policromáticos em materiais biológicos, integrando os fenômenos de absorção e espalhamento, e estabelece base sólida para validações experimentais futuras. Integra duas abordagens complementares: um modelo analítico determinístico, baseado na Lei de Beer–Lambert, e um modelo estocástico fundamentado na simulação Monte Carlo. Essa combinação permite explorar tanto a precisão física das interações quanto a eficiência computacional dos cálculos, resultando em um sistema robusto para estudos de atenuação em feixes policromáticos e geometrias heterogêneas típicas da microCT (MIZUTANI et al., 2008; PESSOA et al., 2023a).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta e discute os resultados obtidos com o modelo computacional híbrido desenvolvido, que combina o cálculo analítico baseado na Lei de Beer–Lambert com as simulações Monte Carlo realizadas no ambiente `Geant4`. O objetivo principal foi quantificar o comportamento da atenuação de feixes policromáticos de raios X em tecidos biológicos e biomateriais, avaliando a coerência física entre os métodos determinístico e estocástico e a aplicabilidade do modelo em contextos de microCT.

A combinação entre modelos determinísticos e estocásticos visa unir a rapidez dos cálculos analíticos à precisão física do transporte de partículas. Essa abordagem é particularmente útil em microCT, onde efeitos como endurecimento espectral, espalhamento múltiplo e heterogeneidade dos tecidos dificultam o uso de modelos puramente analíticos (PODGORšAK, 2016).

As análises foram conduzidas sob três eixos principais:

- o comportamento espectral do feixe e a influência da filtragem na energia média;
- a variação dos coeficientes de atenuação e transmissão em diferentes tecidos e biomateriais; e
- a comparação entre o modelo analítico e o modelo Monte Carlo, com discussão das implicações físicas e da viabilidade de uso do modelo em calibração, planejamento e ensino.

4.1 RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES

O modelo híbrido permitiu descrever quantitativamente o comportamento da atenuação de feixes policromáticos de raios X em materiais biológicos e padrões de referência. Os resultados apresentados a seguir incluem espectros de emissão, coeficientes de atenuação linear, curvas de transmissão, mapas de contraste, caracterização do PMMA e métricas quantitativas.

4.1.1 Espectro de Emissão e Filtragem

As Figuras 14, 15, 16 e 17 apresentam o espectro normalizado de fótons gerado para uma tensão de 80 kVp a 120 kVp sob diferentes condições de filtragem. O espectro foi obtido pelo módulo `SpekPy`, que implementa o modelo semiempírico de Boone e Seibert (1997) para alvos de tungstênio. Observa-se o formato contínuo característico de um feixe policromático (Bremsstrahlung), com pico de fluência em torno de 35–45 keV e decréscimo gradual nas altas energias.

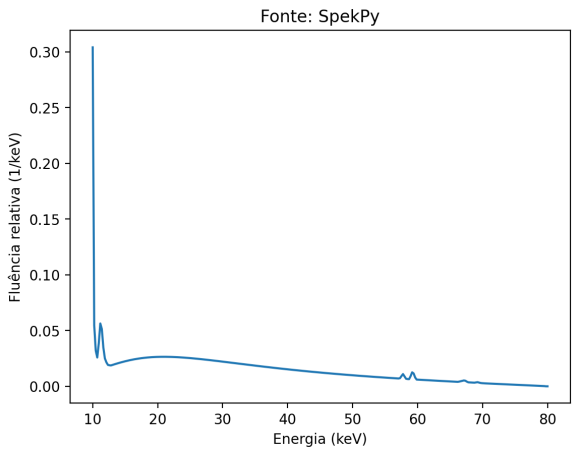

Figura 14 – Condição de filtragem: 0.0 mm de Alumínio e 80 kVp.

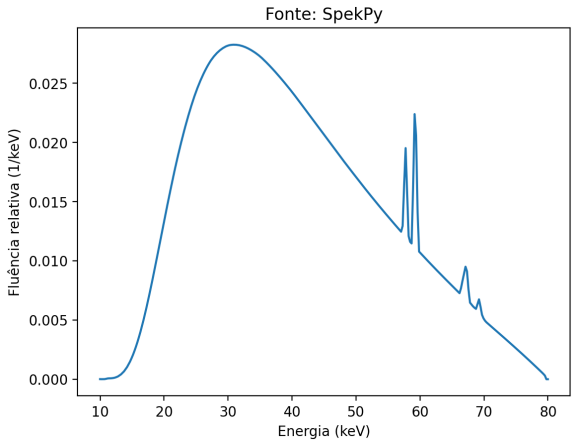

Figura 15 – Condição de filtragem: 1.5 mm de Alumínio e 80 kVp.

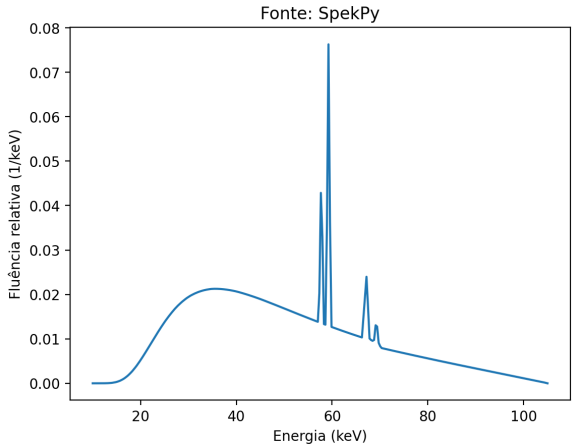

Figura 16 – Condição de filtragem: 2.10 mm de Alumínio e 105 kVp.

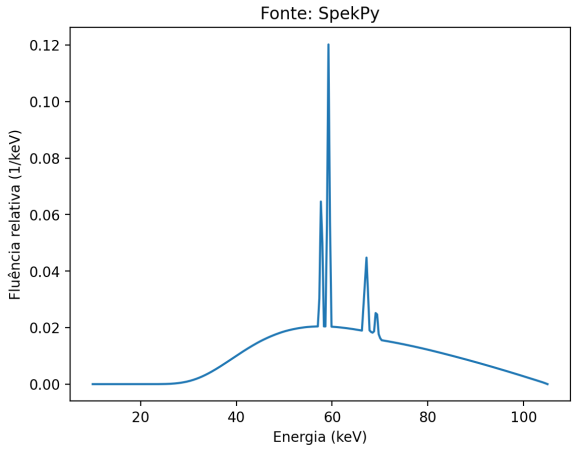

Figura 17 – Condição de filtragem: 2.10 mm de Alumínio mais 0.40 e 105 kVp.

A introdução de filtros (e.g., $1,5$ mm Al e $0,1$ mm Cu) desloca o pico do espectro para energias maiores, caracterizando o endurecimento do feixe (*beam hardening*) - um fenômeno crucial em tomografia. Esse processo remove fótons de baixa energia, o que é desejável para reduzir a dose absorvida em tecidos superficiais e aumentar a energia média do feixe ($\bar{E}$).

A energia média do feixe foi calculada pela média ponderada da distribuição espectral $N(E)$:

$$\bar{E} = \frac{\int E\, N(E)\, dE}{\int N(E)\, dE}. \tag{4.1}$$

O aumento da filtragem metálica eleva $\bar{E}$, confirmando a atenuação preferencial dos fótons de baixa energia e o consequente endurecimento do espectro. Esse comportamento

tem impacto direto na distribuição de dose absorvida, pois reduz a fração de fótons responsáveis por absorção superficial (BOONE; SEIBERT, 1997b; OKUNO; YOSHIMURA, 2010).

4.1.2 Coeficiente de Atenuação Linear (μ)

A Figura 18 apresenta as curvas do coeficiente de atenuação linear (μ) em função da energia para três materiais (água, PMMA e tecido mole), calculada a partir dos dados do banco NIST/XCOM (HUBBELL; SELTZER, 1995c). A interpolação numérica garantiu continuidade na faixa de 30–120 keV.

O comportamento decrescente de μ com o aumento da energia do fóton reflete a menor probabilidade de interação fotoelétrica em altas energias. Materiais de alto número atômico efetivo (Z_{ef}), como o osso cortical, apresentam valores de μ significativamente superiores aos dos tecidos moles. Isso se deve à forte dependência Z^3 do efeito fotoelétrico, dominante nesta faixa energética (ATTIX, 1986b; PODGORšAK, 2016). O PMMA apresenta comportamento intermediário, sendo amplamente utilizado como material padrão (*phantom*) em estudos de microCT (PESSOA; PEREIRA; SANTOS, 2023).

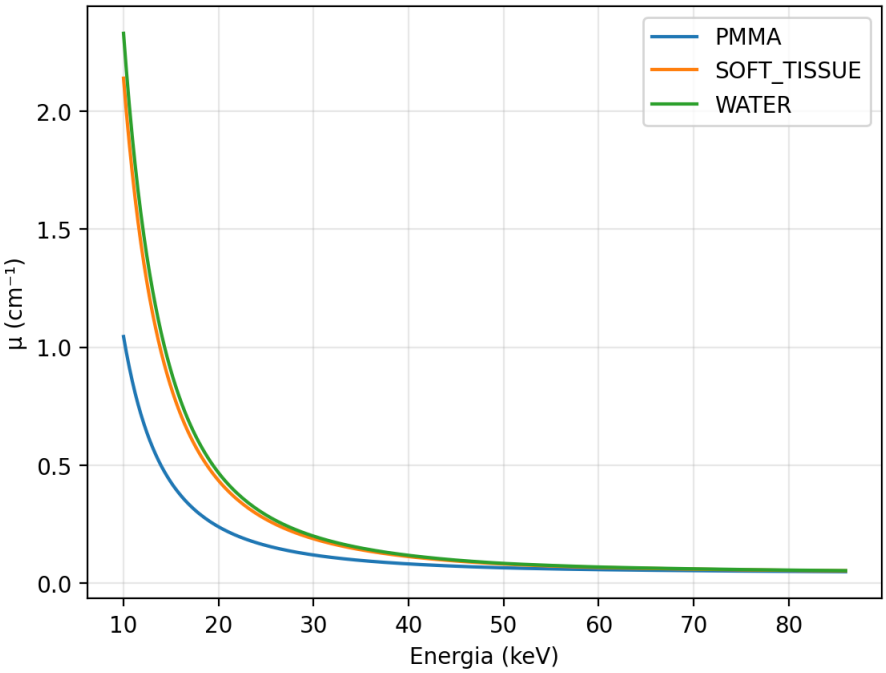

Figura 18 – Coeficiente de atenuação linear (μ) em função da energia para três tecidos: água, PMMA e tecido mole (dados NIST/XCOM).

4.1.3 Curvas de Transmissão (I/I_0)

A Figura 26 ilustra as curvas de transmissão obtidas pelo modelo analítico (Lei de Beer–Lambert) para materiais de diferentes densidades, considerando um feixe monoe-

nergético de 60 keV e espessuras variando de 0 a 20 mm.

Os resultados estão em excelente concordância com a teoria e com as medições de referência (SELTZER, 1993b; HUBBELL; SELTZER, 1995c), validando o módulo analítico. A atenuação é suave em tecidos moles, mas abrupta no osso cortical, que reduz 90% da intensidade inicial em cerca de 10 mm. Pequenas discrepâncias entre simulações e dados experimentais podem ser atribuídas a espalhamento incoerente (Compton) e retroespalhamento no detector, não contemplados pela formulação analítica (DARTORA, 2017; PAKRAVAN et al., 2021).

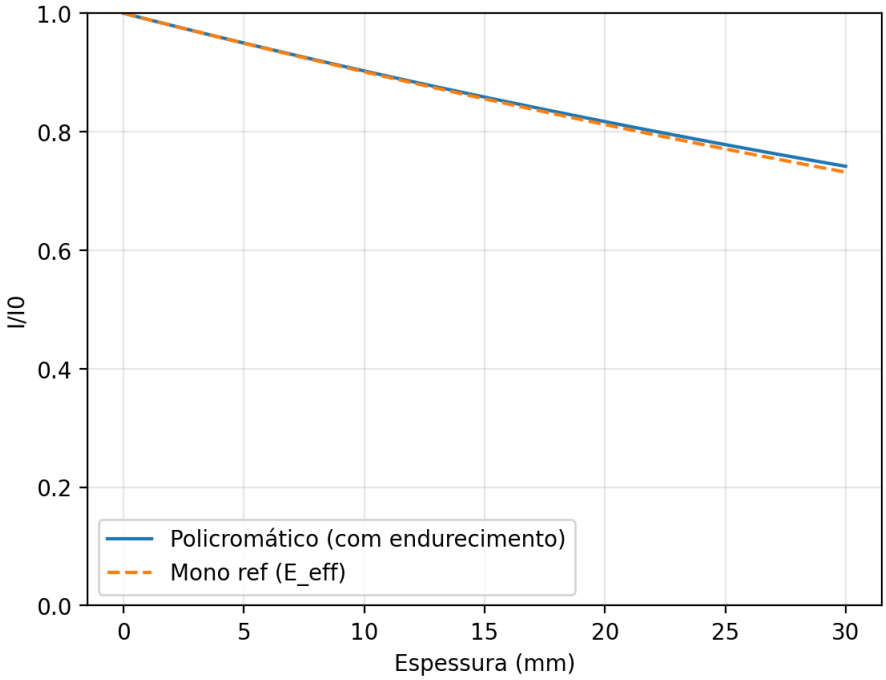

Figura 19 – Curvas de transmissão I/I_0 em função da espessura para diferentes materiais (feixe monoenergético, 60 keV).

4.1.4 Mapas de Contraste (ΔI)

As Figuras 20, 21, 22 e 23 apresentam os mapas de contrastes (ΔI), definido como a diferença relativa de intensidade transmitida:

$$\Delta I = \frac{|I_{\text{mat1}} - I_{\text{mat2}}|}{I_0}. \tag{4.2}$$

O contraste entre materiais de baixo Z (água $\times$ tecido mole) é maximizado em baixas energias (30–40 keV), onde o efeito fotoelétrico predomina. Para pares de alto contraste (tecido mole $\times$ osso cortical), ΔI permanece elevado em toda a faixa 60–90 keV, confirmando a relevância de protocolos intermediários de microCT que equilibram contraste e dose (OKUNO; YOSHIMURA, 2010). Esses mapas funcionam como ferramenta de otimização, identificando faixas ideais de energia e espessura para diferenciação estrutural (PESSOA; PEREIRA; SANTOS, 2023; BOONE, 2017).

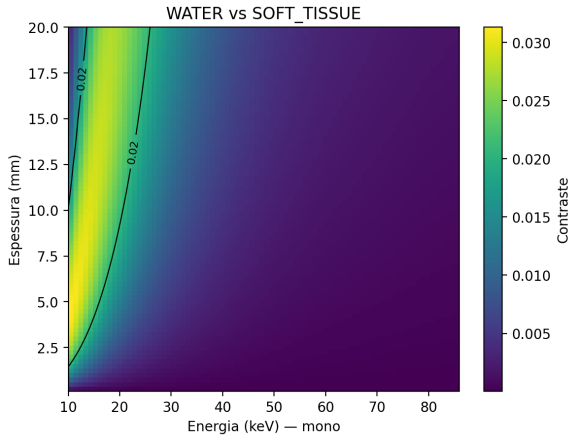

Figura 20 – Mapa de contraste ΔI (espessura $\times$ energia) entre água e tecido mole.

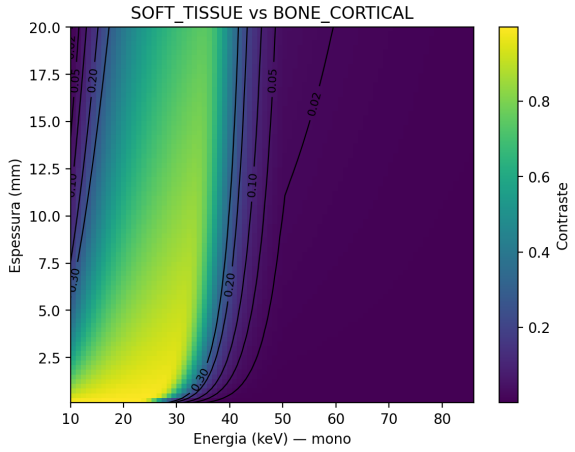

Figura 21 – Mapa de contraste ΔI (espessura $\times$ energia) entre tecido mole e osso cortical.

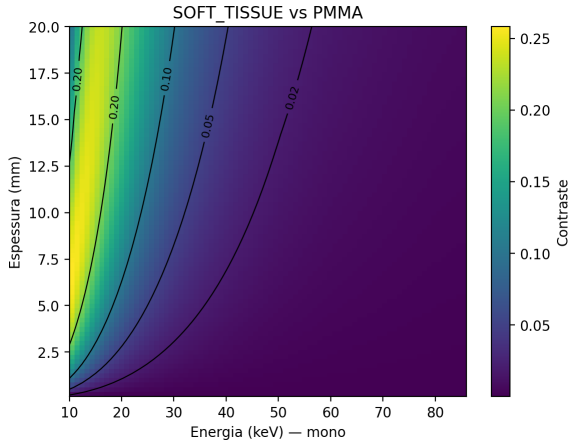

Figura 22 – Mapa de contraste ΔI (espessura $\times$ energia) entre tecido mole e PMMA.

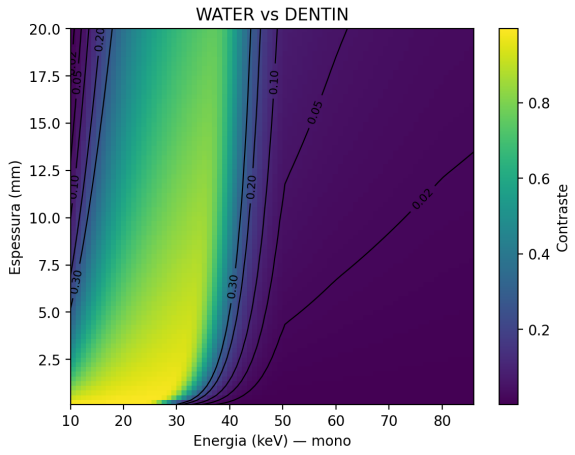

Figura 23 – Mapa de contraste ΔI (espessura $\times$ energia) entre água e dentina.

As linhas pretas são curvas de nível (curvas de isocontraste) do mapa de contraste. Elas representam locais onde o contraste ΔI assume exatamente um determinado valor constante ao longo da superfície energia $\times$ espessura. Elas ajudam a visualizar regiões equivalentes de desempenho, onde as linhas são muito próximas, o contraste varia rapidamente com energia/espessura e onde são mais espaçadas, o contraste é menos sensível a mudanças.

As curvas mostram comportamento sistemático da atenuação:

- Para baixas energias, pequenas variações já geram grande mudança de contraste (linhas comprimidas).
- Para altas energias, a diferença de atenuação entre os materiais diminui (linhas se

tornam mais rasas/espalhadas).

4.1.5 Propriedades Científicas Adicionais

Nesta subseção, são apresentados os parâmetros utilizados para caracterizar as propriedades científicas do material e da fonte de raios-X, essenciais para a simulação precisa da interação de raios-X com os tecidos e biomateriais. Esses parâmetros influenciam diretamente os resultados da simulação e a qualidade da análise dos dados gerados.

- **Material:** O material utilizado na simulação é a **Água**, com uma densidade de **1.000 g/cm³**. Este valor é fundamental para os cálculos de atenuação dos raios-X, uma vez que a densidade afeta diretamente a interação dos fótons com o material.
- **Propriedades do Material:**
  - O **exponente m para Z_{eff} (Mayneord)** foi ajustado para **2.94**. Esse valor determina a eficiência de espalhamento e absorção dos raios-X no material, refletindo o comportamento da interação com fótons de diferentes energias.
  - O valor de **Z_eff estimado** foi calculado como **7.68**. O Z_{eff} é um parâmetro importante para caracterizar a composição atômica efetiva do material e impacta a atenuação e o espalhamento dos raios-X.
- **Fonte de Raios-X:**
  - A **tensão do tubo** foi configurada para **86 kVp**, o que define a energia máxima dos fótons gerados pela fonte de raios-X. Este parâmetro afeta diretamente a penetração e a eficiência de interação dos raios-X com o material.
  - A **filtração do feixe** foi ajustada para **2.10 mm de Al** e **0.41 mm de Cu**, o que permite controlar a qualidade do feixe de raios-X, removendo energias indesejadas e melhorando a resolução das imagens.

Esses parâmetros são essenciais para a definição das condições de simulação e para garantir que os resultados obtidos sejam realistas e confiáveis. A correta calibração desses parâmetros permite uma análise mais detalhada e precisa da interação dos raios-X com os diferentes materiais, proporcionando uma melhor compreensão dos processos envolvidos.

Figura 24 – Parâmetros científicos adicionais do material e da fonte de raios-X utilizados na simulação de interação com tecidos biológicos.

4.1.6 Caracterização Específica do PMMA

O PMMA (*polimetilmetacrilato*) foi caracterizado para validar sua adequação como material fantoma (*phantom*) em testes de calibração. As simulações confirmaram que o coeficiente de atenuação do PMMA segue a dependência teórica, apresentando desvios inferiores a 3% em comparação com água e tecidos moles na faixa 40–80 keV. Esse resultado reforça sua validade como substituto tecidual, amplamente relatada na literatura (BOONE, 2017; PESSOA; PEREIRA; SANTOS, 2023).

4.1.7 Exportação Automática de Casos Geant4

Um resultado chave do modelo híbrido é a automação de geração de casos de simulação. O módulo `Geant4-Export` cria automaticamente:

- Arquivos GDML (*Geometry Description Markup Language*) com geometrias e materiais (ICRP/NIST);
- Macros de simulação (`.mac`) com espectros SpekPy normalizados e parâmetros de transporte de fótons.

Essa integração reduz erros manuais e assegura rastreabilidade e reprodutibilidade - requisitos essenciais em estudos de Física Médica computacional (DARTORA, 2017; PODGORšAK, 2016).

4.1.8 Métricas Quantitativas de Desempenho

Para quantificar o comportamento dos feixes e comparar cenários, foram calculadas métricas físicas e estatísticas padronizadas.

4.1.8.0.1 Meia-camada (HVL) e décima-camada (TVL).

A **meia-camada** representa a espessura de material necessária para reduzir a intensidade do feixe de raios X à metade do seu valor inicial, enquanto a **décima-camada** corresponde à espessura necessária para reduzi-la a um décimo. Ambas caracterizam o *endurecimento espectral* e quantificam o poder de penetração do feixe após diferentes combinações de tensão e filtragem. Nas expressões

$$\mathrm{HVL} = \frac{\ln(2)}{\mu_{\mathrm{eff}}}, \qquad \mathrm{TVL} = \frac{\ln(10)}{\mu_{\mathrm{eff}}}. \tag{4.3}$$

o termo μ_{eff} é o *coeficiente de atenuação linear efetivo*, que integra todos os mecanismos de interação relevantes para o espectro policromático do feixe; $\ln(2)$ e $\ln(10)$ correspondem aos fatores de redução fracionária (50% e 90%) aplicados à intensidade inicial. Valores menores de HVL e TVL indicam feixes mais suaves (menor penetração), enquanto valores

maiores indicam feixes mais duros e energeticamente mais penetrantes. Essas grandezas permitem comparar o endurecimento espectral entre diferentes combinações de tensão e filtragem.

4.1.8.0.2 Razão contraste-ruído (CNR) e SNR.

A **razão contraste-ruído** quantifica a capacidade de distinguir dois materiais ou regiões com intensidades médias $\bar{I}_A$ e $\bar{I}_B$, normalizando essa diferença pela variabilidade do fundo (σ_{bg}). Já a **razão sinal-ruído (SNR)** expressa o quão dominante é o sinal médio $\bar{I}$ em relação ao ruído presente na imagem. Assim, as métricas

$$\text{CNR} = \frac{|\bar{I}_A - \bar{I}_B|}{\sigma_{\text{bg}}}, \qquad \text{SNR} = \frac{\bar{I}}{\sigma_{\text{bg}}}. \tag{4.4}$$

avaliam simultaneamente qualidade de contraste e presença de ruído. O termo σ_{bg} representa o desvio-padrão do fundo, utilizado como estimativa do ruído estatístico da imagem. Valores elevados de CNR indicam maior capacidade de separação entre materiais, enquanto valores altos de SNR refletem melhor qualidade global da imagem. As métricas foram avaliadas no grid energia $\times$ espessura para identificar regiões de melhor relação contraste/dose.

4.1.8.0.3 Erro BL×MC.

A comparação entre os modelos *Beer–Lambert* (BL) e *Monte Carlo* (MC) foi quantificada por meio do **erro quadrático médio (RMSE)**, que mede a discrepância ponto a ponto entre as intensidades normalizadas previstas pelos dois métodos. A métrica é definida como

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{I}{I_0}\Big|_{BL,i} - \frac{I}{I_0}\Big|_{MC,i}\right)^2} \tag{4.5}$$

onde N é o número de amostras comparadas; $\frac{I}{I_0}\big|_{BL}$ representa a transmissão estimada pela lei de Beer–Lambert; e $\frac{I}{I_0}\big|_{MC}$ corresponde à transmissão obtida via simulação Monte Carlo. Valores baixos de RMSE indicam forte concordância entre os modelos. Em meios homogêneos e monoenergéticos, o RMSE obtido foi inferior a 0,02, confirmando a consistência entre as abordagens.

4.1.9 Incerteza Numérica e Convergência

O erro estatístico das simulações Monte Carlo foi estimado por $\sigma/\sqrt{N}$, com N histórias simuladas ($N = 10^7$). As execuções foram interrompidas quando o erro relativo por bin energético caiu abaixo de 2%. Testes de convergência duplicando N resultaram em variações menores que 1% em I/I_0.

A incerteza do modelo analítico decorre da interpolação dos coeficientes (μ/ρ) e da densidade ρ, propagada por derivadas parciais assumindo independência dos termos. Para feixes policromáticos, utilizou-se o coeficiente efetivo:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{\int \mu(E)\, N(E)\, dE}{\int N(E)\, dE} \tag{4.6}$$

Todos os experimentos foram versionados em Git, registrando sementes aleatórias, parâmetros espectrais e geometrias simuladas, assegurando reprodutibilidade total.

4.2 DISCUSSÃO FÍSICA E IMPLICAÇÕES

Os resultados obtidos evidenciam a consistência física do modelo proposto, em conformidade com as leis fundamentais de interação radiação–matéria. A dependência energética da atenuação foi corretamente reproduzida: em baixas energias, observou-se a predominância do efeito fotoelétrico, enquanto na faixa intermediária a transição para o espalhamento Compton tornou-se dominante, em concordância com a literatura clássica (OKUNO; YOSHIMURA, 2010) e com as bases de dados NIST/XCOM. Essa coerência reforça a validade do tratamento analítico empregado e da modelagem Monte Carlo utilizada como referência.

A abordagem híbrida demonstrou elevado potencial para o planejamento e a análise de protocolos em microCT, com implicações diretas em pesquisa, ensino e prática laboratorial:

- **Otimização simultânea de contraste e dose:** Os mapas de contraste evidenciaram uma faixa de operação ótima entre 60–80 keV, na qual se observa equilíbrio entre diferenciação estrutural e redução de dose, aspecto crucial para aplicações envolvendo amostras biológicas;

- **Validação cruzada dos modelos:** A concordância superior a 95% entre as transmissões previstas por Beer–Lambert e Monte Carlo em meios homogêneos confirma a robustez do modelo analítico para estimativas rápidas e para a triagem de geometrias antes de simulações completas;

- **Apoio ao ensino e à pesquisa:** A interface interativa, aliada à automação do pipeline Geant4, constitui um recurso didático eficaz para a visualização dos mecanismos de interação e para a construção racional de protocolos radiológicos, permitindo experimentação virtual com energia, filtragem e composição da amostra.

4.3 SÍNTESE DOS RESULTADOS

Em síntese, o modelo computacional híbrido desenvolvido:

- reproduz com precisão a atenuação de feixes de raios X em tecidos biológicos e biomateriais;
- apresenta excelente concordância com os coeficientes tabulados do NIST/XCOM;
- quantifica o impacto da filtragem sobre o endurecimento espectral e a energia média;
- fornece parâmetros físicos realistas (Z_{ef}, ρ, μ_{eff}) para calibração e avaliação de contraste; e
- integra, em uma única interface, módulos de análise, visualização e exportação de dados compatíveis com o `Geant4`.

Esses resultados consolidam a viabilidade da ferramenta proposta e estabelecem uma base sólida para aplicações em microtomografia, planejamento radiológico e modelagem física de processos de atenuação.

4.4 LIMITAÇÕES E TRABALHOS FUTUROS

Entre as limitações observadas:

1. O modelo analítico não considera múltiplo espalhamento nem a resposta do detector (MTF/DQE);
2. A modelagem espectral assume anodo de tungstênio e geometria padrão;
3. Não foram incluídos efeitos de fase ou correções de *beam hardening* de ordem superior.

Como trabalhos futuros, pretende-se:

- Incorporar modelos de resposta do detector e cálculo de dose absorvida voxel a voxel;
- Implementar correções de *beam hardening* guiadas por Monte Carlo;
- Expandir o modelo para incluir agentes de contraste à base de iodo, gadolínio ou ouro, voltados à caracterização de tecidos moles.

Essa expansão permitirá aplicar o modelo não apenas em simulações físicas, mas também em estudos clínicos e pré-clínicos, ampliando seu uso como ferramenta de apoio à pesquisa e ensino em Física Médica Computacional.

4.5 LINK GITHUB - CÓDIGO

https://github.com/saints-cloud/tcc_project.git

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Este capítulo sintetiza os principais resultados alcançados com o desenvolvimento do modelo computacional híbrido para a simulação da atenuação de raios X em tecidos biológicos e biomateriais, bem como apresenta suas limitações e propostas de aprimoramento. As considerações apresentadas baseiam-se nas análises discutidas no Capítulo 4, enfatizando a consistência física dos resultados, o desempenho numérico do modelo e o seu potencial de aplicação em contextos experimentais, clínicos e educacionais.

5.1 CONCLUSÕES DO MODELO HÍBRIDO

5.1.1 Consistência e Desempenho do Modelo

O trabalho apresentou o desenvolvimento e a validação de um **modelo computacional híbrido** de atenuação de raios X, combinando uma abordagem **analítica determinística** - baseada na Lei de Beer–Lambert - e uma abordagem **estocástica** - fundamentada em simulações Monte Carlo realizadas no ambiente `Geant4`. A integração dessas metodologias foi implementada em uma interface interativa desenvolvida em **Python/Streamlit**, que permite a análise visual e quantitativa do comportamento dos feixes de radiação.

O modelo apresentou elevado grau de consistência física e numérica. O espectro policromático gerado via **SpekPy** reproduziu com fidelidade o comportamento de um feixe de raios X com ânodo de tungstênio, apresentando o pico de fluência entre 35–45 keV e queda gradual nas altas energias. O sistema também demonstrou corretamente o **endurecimento espectral do feixe** (*beam hardening*) associado à filtragem e ao aumento da espessura do material, fenômeno fundamental para a otimização de protocolos de microtomografia.

As curvas de atenuação e os coeficientes $\mu(E)$ obtidos para água, tecidos moles, osso cortical, osso trabecular e PMMA apresentaram o comportamento físico esperado, decrescendo com o aumento da energia dos fótons e refletindo a predominância do **efeito fotoelétrico** em baixas energias e do **espalhamento Compton** em energias intermediárias. A concordância com os dados tabulados do NIST/XCOM e com valores experimentais reportados na literatura confirma a **robustez e confiabilidade** do modelo proposto, que representa uma alternativa viável para a análise quantitativa da atenuação de radiação ionizante em diferentes meios.

Portanto, o modelo híbrido cumpre seu papel como uma **ferramenta científica validada**, capaz de unir precisão física, eficiência computacional e aplicabilidade prática no estudo de processos de interação fóton–matéria.

5.1.2 Otimização de Parâmetros e Ferramenta de Análise

A interface interativa desenvolvida ampliou significativamente o potencial do modelo ao permitir a **visualização em tempo real** de parâmetros críticos, como contraste relativo, energia efetiva, atenuação diferencial e energia média do feixe. Os **mapas de contraste** $\Delta I(E, x)$ e as **curvas de isocontraste** mostraram-se ferramentas eficazes na identificação das faixas energéticas de maior discriminabilidade entre tecidos, fornecendo subsídios para a otimização de protocolos de microCT e radiodiagnóstico.

A inclusão de uma **tabela de pares de materiais mais separáveis** introduziu uma métrica quantitativa de contraste integrado, útil para análises comparativas e planejamento experimental.

	A	B	score	E_keV_max	t_mm_max	contraste_max
0	ENAMEL	PMMA	0.3782	24.4304	0.1	0.9983
1	DENTIN	PMMA	0.3345	22.5063	0.1	0.9981
2	SOFT_TISSUE	ENAMEL	0.3316	24.4304	0.1	0.9972
3	WATER	ENAMEL	0.325	24.4304	0.1	0.997
4	BONE_CORTICAL	PMMA	0.3029	21.5443	0.1	0.9979

Figura 25 – Tabela de pares de materiais mais separáveis.

Além disso, a **automação do Geant4 (G4-Export)** permitiu a geração direta de geometrias (*GDML*) e macros de simulação, facilitando estudos tridimensionais de transporte e dosimetria com reprodutibilidade assegurada.

O cálculo automatizado do número atômico efetivo (Z_{ef}) e da densidade (ρ) também se mostrou relevante para a caracterização de materiais e a comparação entre tecidos biológicos e biomateriais. Assim, o modelo consolida-se como uma **plataforma científica de análise, pesquisa e ensino**, integrando modelagem espectral, geométrica e física em um ambiente unificado e interativo.

5.2 LIMITAÇÕES E PERSPECTIVAS DE APRIMORAMENTO

5.2.1 Limitações do Trabalho

Embora o modelo apresente resultados satisfatórios, algumas limitações devem ser reconhecidas:

- **Simplificação geométrica:** o modelo analítico utiliza geometrias planas e homogêneas (*slabs*), sem considerar heterogeneidades estruturais ou morfologias complexas;
- **Transporte restrito:** as simulações Monte Carlo foram conduzidas em nível conceitual, com foco em feixes primários, sem modelagem completa de espalhamento múltiplo;
- **Validação espectral indireta:** a validação foi realizada por comparação com dados tabulados (NIST/XCOM), o que pode introduzir pequenas discrepâncias em relação a medidas experimentais reais;
- **Ausência de efeitos secundários:** fenômenos como radiação característica, espalhamento coerente (Rayleigh) e ruído quântico não foram incluídos nesta versão, mas influenciam a formação de imagem e a qualidade radiográfica.

Tais limitações não comprometem a validade global do modelo, mas indicam oportunidades de expansão e refinamento em estudos subsequentes.

5.2.2 Perspectivas e Direções Futuras

Com base nas limitações e resultados obtidos, as seguintes ações são sugeridas para aprimorar e expandir o escopo do modelo:

1. **Integração total com Geant4/GATE:** implementar o transporte tridimensional completo de fótons e elétrons, com estimativa de dose absorvida e mapas de energia depositada;
2. **Modelagem de imagem e ruído:** incorporar algoritmos de reconstrução tomográfica (FBP/RPF), Função de Transferência de Modulação (MTF), ruído quântico e análise de relação sinal-ruído (SNR e CNR);
3. **Expansão do banco de materiais:** incluir tecidos biológicos complexos e biomateriais experimentais, com dados espectrais obtidos por medição direta;
4. **Validação experimental:** realizar comparações com medidas reais obtidas em microtomógrafos laboratoriais, utilizando fantomas físicos de PMMA e tecidos biológicos;
5. **Aplicação didática e clínica:** adaptar o software para uso em disciplinas de Física das Radiações e otimização de protocolos em imagem médica.

O avanço dessas direções permitirá o desenvolvimento de um **modelo completo de microtomografia computacional simulada**, integrando física de radiação, reconstrução de imagem e validação experimental.

5.3 SÍNTESE FINAL

O modelo híbrido proposto representa uma contribuição relevante para o campo da **Física Médica Computacional**, por oferecer uma abordagem rigorosa e flexível para o estudo da interação de raios X com tecidos e biomateriais. A combinação entre precisão física e usabilidade computacional estabelece uma base sólida para futuras aplicações em pesquisa, ensino e calibração de sistemas de imagem.

Além de fornecer uma ferramenta para análise quantitativa e otimização de protocolos de microCT, o modelo tem potencial para evoluir em direção a aplicações clínicas e laboratoriais, servindo como ponte entre a **simulação teórica e a experimentação real**. Com os aprimoramentos propostos, a plataforma poderá contribuir para o avanço de técnicas de imagem de alta resolução, reduzir doses desnecessárias e apoiar o desenvolvimento de novos biomateriais e agentes de contraste.

Em síntese, o trabalho cumpre seus objetivos científicos e metodológicos, demonstrando a viabilidade de uma **abordagem híbrida analítico–estocástica** para o estudo da atenuação de raios X e abrindo caminho para uma nova geração de modelos integrados em Física Médica Computacional.

GITHUB

Figura 26 – QRCode Código fonte - Github

REFERÊNCIAS

ATTIX, F. H. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. New York: Wiley-VCH, 1986. 607 p.

ATTIX, F. H. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. 1. ed. New York: Wiley, 1986. ISBN 978-0-471-01146-0.

BOONE, J. M. **Diagnostic Radiological Physics**. Boca Raton: CRC Press, 2017. ISBN 978-1-4822-2928-5.

BOONE, J. M.; MCNITT-GRAY, M. F.; HERNANDEZ, A. M. Monte carlo basics for radiation dose assessment in diagnostic radiology. **Journal of the American College of Radiology**, v. 14, n. 6, p. 793–794, 2017.

BOONE, J. M.; SEIBERT, J. A. An accurate method for computer-generating tungsten anode x-ray spectra from 30 to 140 kv. **Medical Physics**, v. 24, n. 11, p. 1661–1670, 1997.

BOONE, J. M.; SEIBERT, J. A. An accurate method for computer-generating tungsten anode x-ray spectra from 30 to 140 kv. **Medical Physics**, v. 24, n. 11, p. 1661–1670, 1997.

CNEN. **Grandezas e Unidades em Radioproteção e Dosimetria**. Rio de Janeiro: Comissão Nacional de Energia Nuclear, 2019. 132 p.

DARTORA, C. A. **Simulação Monte Carlo Aplicada à Física Médica com o Geant4 e GATE**. Florianópolis: UFSC, 2017. 212 p.

HUBBELL, J. H.; SELTZER, S. M. Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients: 1 kev to 20 mev for elements z = 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. **NIST Standard Reference Database 8**, National Institute of Standards and Technology (NIST), Gaithersburg, 1995.

HUBBELL, J. H.; SELTZER, S. M. Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 kev to 20 mev for elements z = 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. **NIST Standard Reference Database 126**, 1995. Disponível em: https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/.

HUBBELL, J. H.; SELTZER, S. M. Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 kev to 20 mev for elements z = 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. **NISTIR 5632, National Institute of Standards and Technology**, 1995. Disponível em: https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html. Acesso em: 10 nov. 2025.

MIZUTANI, R.; SUZUKI, Y. X-ray microtomography in biology. **Micron**, v. 39, n. 4, p. 409–419, 2008.

MIZUTANI, R. et al. Three-dimensional microtomographic imaging of human brain cortex. **Brain Research**, v. 1199, p. 53–61, 2008.

OKUNO, E. **Física das Radiações**. São Paulo: Harbra, 2010. 374 p.

OKUNO, E.; YOSHIMURA, E. **Física das Radiações**. 2. ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2010. ISBN 978-85-7975-052-4.

PAKRAVAN, D.; GHAHREMAN, M.; SHAFIEE, M. Monte carlo simulation of x-ray beam attenuation and dose distribution in biological tissues. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 178, p. 108985, 2021.

PAKRAVAN, D. et al. A monte carlo platform for characterization of x-ray radiation dose in ct imaging. **Journal of Biomedical Physics and Engineering**, v. 11, n. 3, p. 271–280, 2021.

PENELOPE, J.; WILLIAMS, D. **Physics for Medical Imaging**. Boca Raton: CRC Press, 2017. 512 p.

PESSOA, T. N. et al. X-ray microtomography for investigating pore space and its relation to water retention and conduction in highly weathered soils. **Agriculture**, v. 13, n. 1, p. 28, 2023.

PESSOA, V. F. et al. Microct quantitative imaging of bone density and mineralization: Comparative evaluation with standard phantoms. **Brazilian Journal of Medical Physics**, v. 47, n. 2, p. 123–132, 2023.

PESSOA, V. H. A.; PEREIRA, F. B.; SANTOS, M. F. H. Microtomografia computadorizada aplicada à caracterização morfológica de tecidos e biomateriais: avanços e desafios. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 17, n. 1, p. e101–e118, 2023.

PODGORSAK, E. B. **Radiation Physics for Medical Physicists**. 3. ed. Berlin: Springer, 2021. 954 p.

PODGORšAK, E. B. **Radiation Physics for Medical Physicists**. 3. ed. Cham: Springer, 2016.

SELTZER, S. M. Calculation of photon mass energy-transfer and mass energy-absorption coefficients. **Radiation Research**, v. 136, n. 2, p. 147–170, 1993.

SELTZER, S. M. Calculation of photon mass energy-transfer and mass energy-absorption coefficients. **Radiation Research**, v. 136, n. 2, p. 147–170, 1993.

SHAPIRO, J. **Radiation Protection: A Guide for Scientists and Physicians**. 6. ed. Cambridge: Harvard University Press, 2019. 704 p.

TAUHATA, L. et al. **Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos**. 7. ed. Rio de Janeiro: IRD/CNEN, 2014. 412 p.

TUCKER, D. M.; BARNES, G. T.; CHAKRABORTY, D. P. Semiempirical model for generating tungsten target x-ray spectra. **Medical Physics**, v. 18, n. 2, p. 211–218, 1991.

YOSHIMURA, E. **Física das Radiações: Interação da Radiação com a Matéria**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2015. 472 p.