

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

RUY DA SILVA RAYOL NETO

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

RIO DE JANEIRO

2023

RUY DA SILVA RAYOL NETO

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

Trabalho de conclusão de curso de graduação  
apresentado ao Instituto de Física da Univer-  
sidade Federal do Rio de Janeiro como requi-  
sito para a obtenção do título de Bacharel em  
Física Médica.

Orientadora:

Prof<sup>a</sup>. Dra. Simone Coutinho Cardoso

Coorientador:

Prof. Dr. Luiz Antonio Ribeiro da Rosa

RIO DE JANEIRO

2023

## CIP - Catalogação na Publicação

N469s      Neto, Ruy da Silva Rayol  
Simulações de experimentos didáticos em física  
médica com o código computacional TOPAS MC / Ruy da  
Silva Rayol Neto. -- Rio de Janeiro, 2023.  
57 f.

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

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

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

RUY DA SILVA RAYOL NETO

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

Trabalho de conclusão de curso de graduação  
apresentado ao Instituto de Física da Univer-  
sidade Federal do Rio de Janeiro como requi-  
sito para a obtenção do título de Bacharel em  
Física Médica.

Aprovada em janeiro de 2024.

BANCA EXAMINADORA

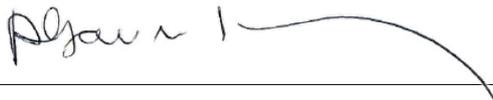


---

Dr<sup>a</sup> Simone Coutinho Cardoso - IF/UFRJ (orientadora)

---

Dr. Lucas Paixão Reis - UFMG



---

Dr. Alessandro Facure Neves de Salles Soares - CNEN

Rio de Janeiro

2023

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

# Agradecimentos

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

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

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

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

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

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

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

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

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

# Resumo

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

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

# Abstract

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

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

# Lista de Figuras

1	Seções de choque para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, produção de pares e tripletos em carbono. Gráfico traduzido e adaptado de <a href="#">Berger et al. (1999)</a> . . . . .	16
2	Importância relativa dos três principais tipos de interações de fótons. Figura traduzida e adaptada de <a href="#">Andreo et al. (2017)</a> . . . . .	17
3	Ilustração do efeito fotoelétrico. . . . .	18
4	Seções de choque do efeito fotoelétrico para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de <a href="#">Berger et al. (1999)</a> . . . . .	19
5	Ilustração do espalhamento Compton. . . . .	20
6	Seções de choque do efeito Compton para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de <a href="#">Berger et al. (1999)</a> . . . . .	21
7	Ilustração da produção de pares. . . . .	22
8	Seções de choque de produção de pares para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de <a href="#">Berger et al. (1999)</a> . . . . .	23
9	Ilustração da produção de tripletos. . . . .	23
10	Seções de choque de produção de tripletos para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de <a href="#">Berger et al. (1999)</a> . . . . .	24
11	Esquema de irradiação de feixe estreito. Figura traduzida e adaptada de <a href="#">Bushberg et al. (2012)</a> . . . . .	25
12	Diagrama simplificado das principais interações de partículas carregadas com o átomo, dependendo do parâmetro de impacto $b$ relativo ao raio atômico $r_a$ . Colisão inelástica <i>dura</i> (a) e <i>suave</i> (b), para $b \approx r_a$ e $b \gg r_a$ , respectivamente, e colisão inelástica radiativa (c) e elástica (d), para $b \ll r_a$ ( <a href="#">SOUZA, 2022</a> ) . . . . .	26

13	Esquema de irradiação para obter PDP. Figura traduzida e adaptada de <a href="#">Khan e Gibbons (2014)</a> . . . . .	30
14	Probabilidade de lançamentos de moeda que resultaram em coroa à medida que o número de lançamentos aumenta. . . . .	31
15	Estrutura do código de Monte Carlo (MC) TOPAS MC ( <a href="#">SOUZA, 2022</a> ). . . . .	32
16	Representação do mecanismo de inclusão de arquivos ( <a href="#">SOUZA, 2022</a> ). . . . .	33
17	Volume cúbico subdividido em 11 <i>bins</i> nas direções x, y e z ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	34
18	(a) Exemplo de parte de um arquivo de entrada no qual o material é definido, uma placa composta por osso de 6 cm de comprimento no eixo z. (b) Configuração típica de materiais que não estão inclusos no código, como água sólida ou PMMA, usando sua composição, frações e densidades ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ) . . . . .	37
19	Esquema para definir tamanho de campo quadrado de uma fonte posicionada no ponto B ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	38
20	Ilustração esquemática da irradiação do simulador no TOPAS MC ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	39
21	Validação do código para espectros de 6 (a), 10 (b) e 15 MV (c). O volume alvo simulado de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ de água foi dividido em 15 <i>bins</i> em x, 15 <i>bins</i> em y e 120 <i>bins</i> em z. . . . .	44
22	Resultados das simulações utilizando $10^6$ , $10^7$ e $10^9$ histórias ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	45
23	Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 15 MV ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	46
24	Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 6 MV ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	47
25	Gráfico de dose percentual por profundidade para espectros de fótons de 6, 10 e 15 MV. Os feixes incidiram em um bloco de água de $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ com um campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ( <a href="#">NETO et al., 2022</a> ). . . . .	48

- 
- 26 Gráfico comparativo de dose percentual por profundidade entre os simuladores A (5 cm de água/3 cm de osso cortical/5 cm de água) e B (5 cm de água/3 cm de pulmão/5 cm de água), ambos irradiados por um espectro de fótons de 15 MV com um campo de  $2 \times 2 \text{ cm}^2$  (NETO et al., 2022). . . . . 49
- 27 Gráfico de dose percentual por profundidade para espectros de elétrons de diferentes energias. Os feixes incidiram em um bloco de água de  $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$  com um campo de  $10 \times 10 \text{ cm}^2$  (NETO et al., 2022). . . . . 50
- 28 Parâmetros de alcance de um feixe de elétrons de 16 MeV. São eles: alcance equivalente a 90% da dose máxima ( $R_{90}$ ), alcance equivalente a 50% da dose máxima ( $R_{50}$ ), alcance prático ( $R_p$ ) e alcance máximo ( $R_{máx}$ ) (NETO et al., 2022). . . . . 51

# Lista de Tabelas

1	Exemplo de arranjo dos dados de saída de uma simulação do TOPAS MC.	35
2	Simulações didáticas realizadas (NETO et al., 2022).	41
3	Comparação entre os valores obtidos com o TOPAS MC e os valores de referência (SHEIKH-BAGHERI; ROGERS, 2002). O teste de compatibilidade foi realizado a partir da equação 3.2.	44

# Lista de Abreviaturas e Siglas

**CAD** Computer Aided Design

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

**CSV** Comma Separated Values (formato de arquivo)

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

**EGS** Electron Gamma Shower

**GATE** GEANT4 Application For Tomographic Emission

**HLX** Metade do Comprimento em X

**HLY** Metade do Comprimento em Y

**HLZ** Metade do Comprimento em Z

**MC** Monte Carlo

**MCNP6** Monte Carlo N-Particle

**PDP** Porcentagem de Dose em Profundidade

**SSD** Source-skin distance (distância fonte-superfície)

**TOPAS MC** TOol For PArticle Simulation

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>15</b>
2.1	Interação da radiação com a matéria . . . . .	15
2.1.1	Tipos de radiação . . . . .	15
2.1.2	Seção de choque . . . . .	15
2.1.3	Interações de radiação eletromagnética com a matéria . . . . .	16
2.1.3.1	Efeito fotoelétrico . . . . .	18
2.1.3.2	Espalhamento Compton . . . . .	19
2.1.3.3	Produção de pares . . . . .	21
2.1.3.4	Produção de tripletos . . . . .	23
2.1.3.5	Atenuação exponencial de fótons . . . . .	24
2.1.4	Interações de partículas carregadas com a matéria . . . . .	25
2.1.4.1	Colisão elástica . . . . .	27
2.1.4.2	Colisão inelástica suave . . . . .	27
2.1.4.3	Colisão inelástica dura . . . . .	27
2.1.4.4	Colisão inelástica radiativa . . . . .	27
2.1.5	Alcance . . . . .	28
2.1.6	Deposição de dose . . . . .	28
2.1.6.1	Porcentagem de dose profunda . . . . .	29
2.2	Método de Monte Carlo . . . . .	30
2.2.1	Lei dos Grandes Números . . . . .	30

---

2.2.1.1	TOPAS MC . . . . .	31
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>36</b>
3.1	TOPAS MC . . . . .	36
3.1.1	Validação do código . . . . .	38
3.1.2	Estatística . . . . .	39
3.1.3	Simulações didáticas . . . . .	40
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>43</b>
4.1	Validação do código . . . . .	43
4.2	Estatística . . . . .	44
4.3	Tamanho de campo . . . . .	45
4.4	Fótons em meio homogêneo . . . . .	47
4.5	Fótons em meio heterogêneo . . . . .	49
4.6	Elétrons . . . . .	50
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>52</b>
<b>6</b>	<b>PERSPECTIVAS FUTURAS</b>	<b>54</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>55</b>

# 1 INTRODUÇÃO

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

# 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

## 2.1 Interação da radiação com a matéria

### 2.1.1 Tipos de radiação

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

### 2.1.2 Seção de choque

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

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

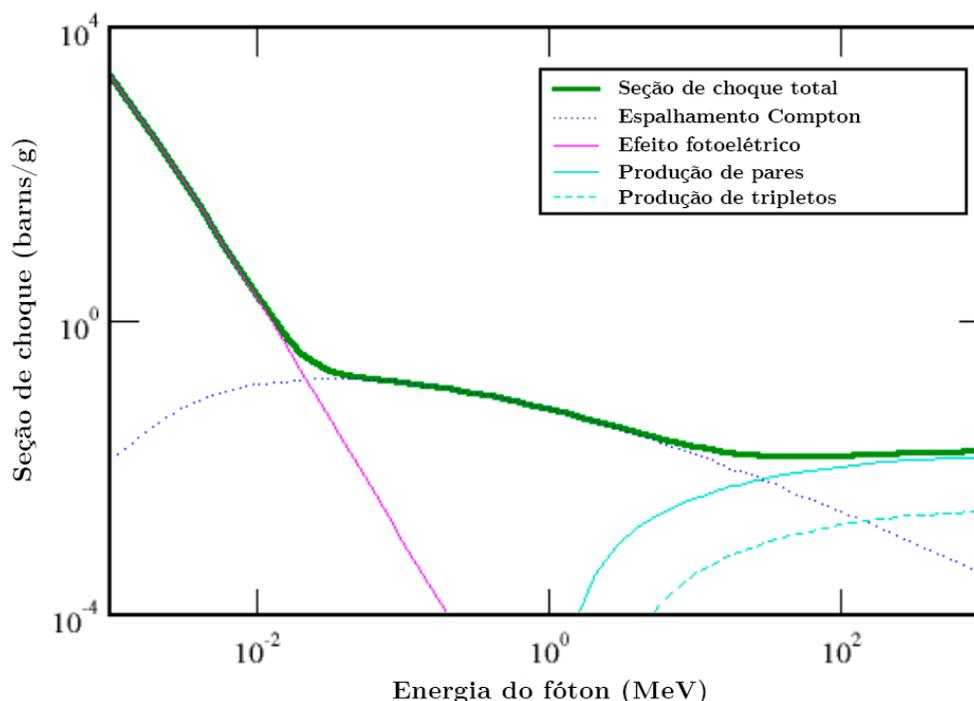


Figura 1: Seções de choque para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, produção de pares e tripletos em carbono. Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

### 2.1.3 Interações de radiação eletromagnética com a matéria

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

$$E = h\nu \quad \text{ou} \quad E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.1)$$

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

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

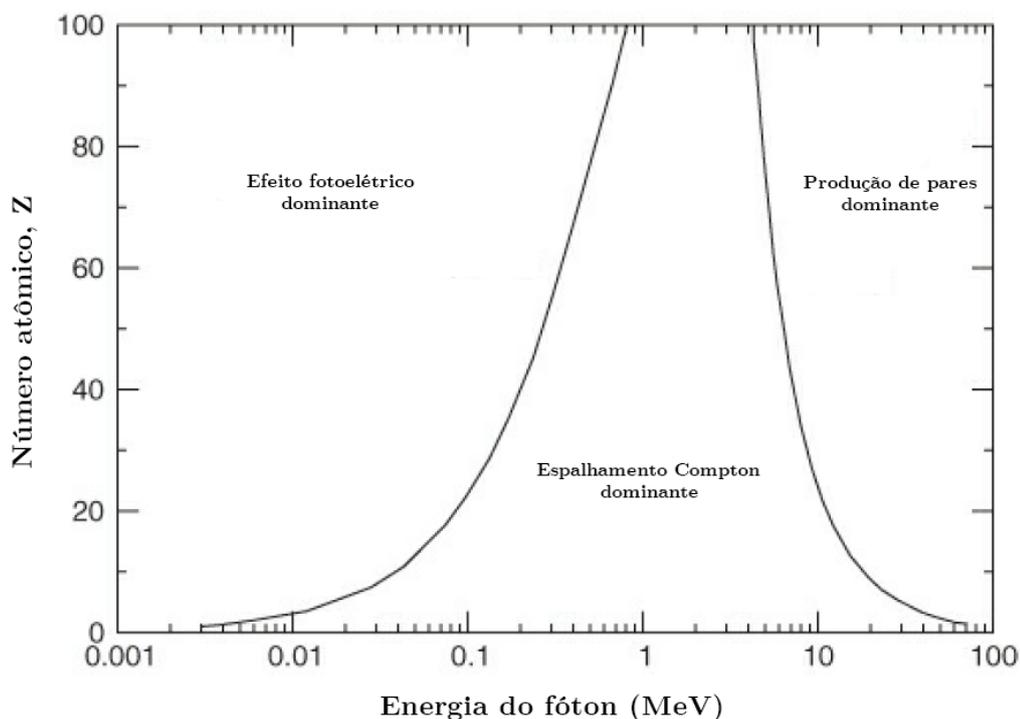


Figura 2: Importância relativa dos três principais tipos de interações de fótons. Figura traduzida e adaptada de [Andreo et al. \(2017\)](#).

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

Nenhum dos casos é relevante para este trabalho.

### 2.1.3.1 Efeito fotoelétrico

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

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

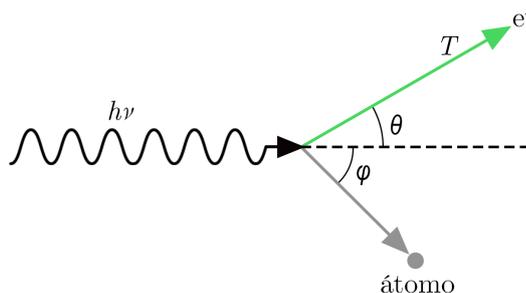


Figura 3: Ilustração do efeito fotoelétrico.

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

$$\sigma_{ef} \approx k \frac{Z^n}{h\nu^m} \quad (2.2)$$

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

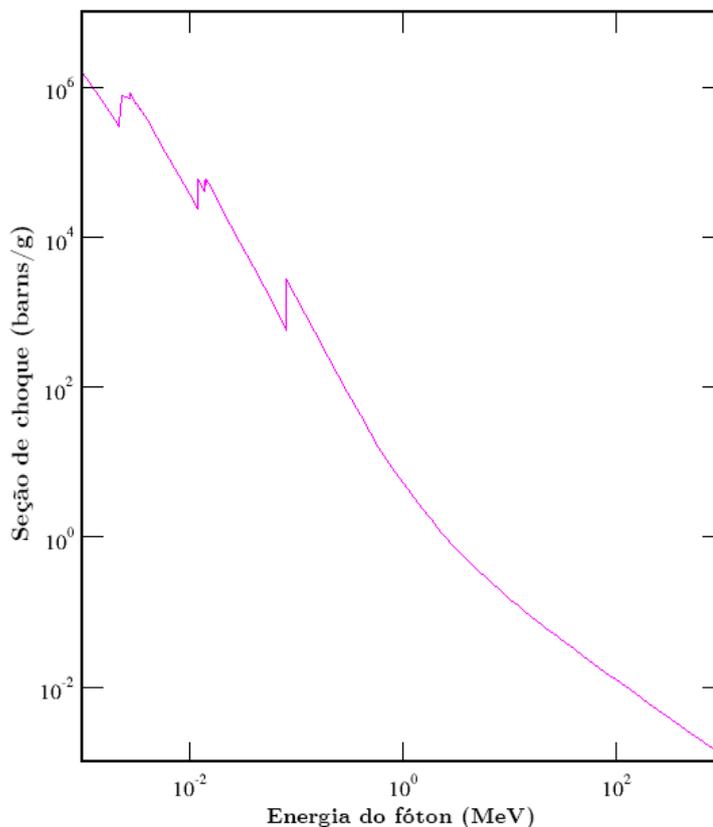


Figura 4: Seções de choque do efeito fotoelétrico para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

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

### 2.1.3.2 Espalhamento Compton

O espalhamento Compton, representado na Figura 5, descreve a incidência de um fóton de energia  $h\nu$  em um elétron fracamente ligado, considerado livre e estacionário. Esta interação resulta na transferência de energia para o elétron, ejetando-o com energia cinética  $T$  a um ângulo  $\theta$ , e, para conservação de momento, a formação de um fóton espalhado a um ângulo  $\varphi$  com energia  $h\nu'$  dada pela equação 2.3.

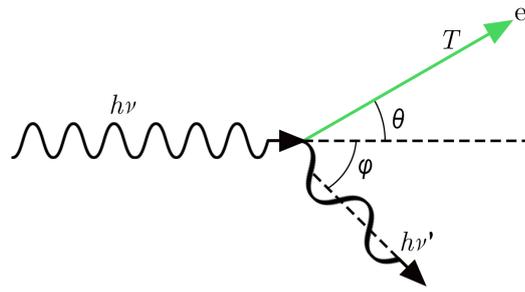


Figura 5: Ilustração do espalhamento Compton.

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \phi)} \quad (2.3)$$

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

$$h\nu = T + h\nu' \quad (2.4)$$

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

$$\sigma_C = \sigma_{KN} \cdot S \quad (2.5)$$

$$\sigma_{KN} = \frac{r_e^2}{2} \frac{h\nu'}{h\nu} \left( \frac{h\nu}{h\nu'} + \frac{h\nu'}{h\nu} - \sin^2 \phi \right) \quad (2.6)$$

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

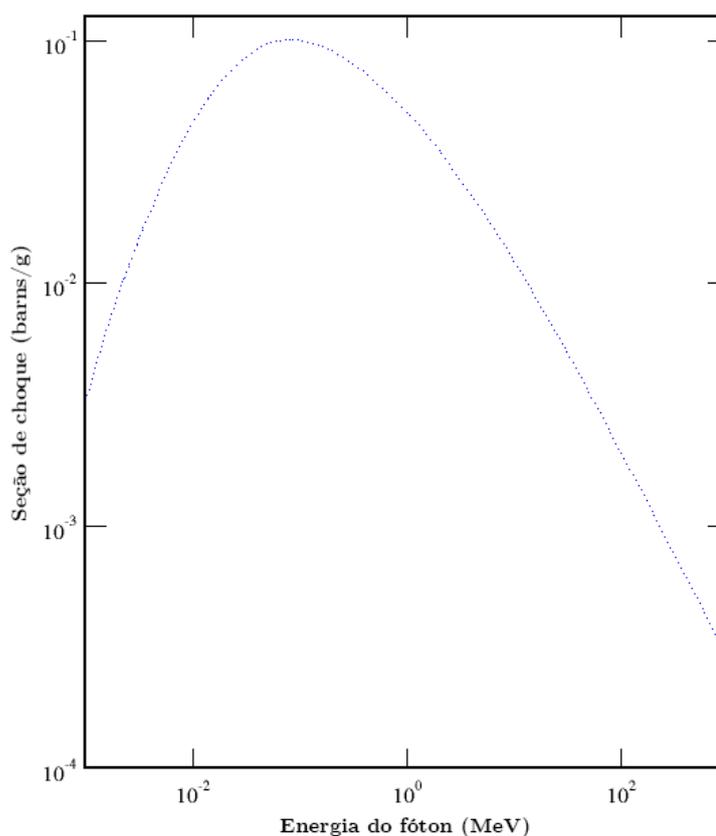


Figura 6: Seções de choque do efeito Compton para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

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

### 2.1.3.3 Produção de pares

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

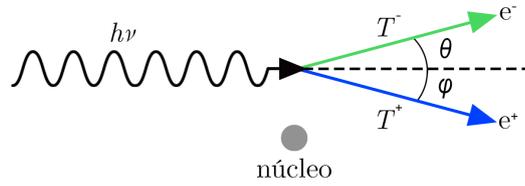


Figura 7: Ilustração da produção de pares.

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

$$\bar{T} = \frac{h\nu - 1,022}{2} \quad (2.7)$$

A atração e repulsão nuclear tendem a dar uma energia ligeiramente mais elevada ao pósitron em relação ao elétron (a diferença sendo de, no máximo,  $0,0075Z$  MeV). A seção de choque para produção de pares  $\sigma_{PP}$  é dada por:

$$\sigma_{PP} = \frac{r_e^2 Z^2 \bar{P}}{137} \quad (2.8)$$

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

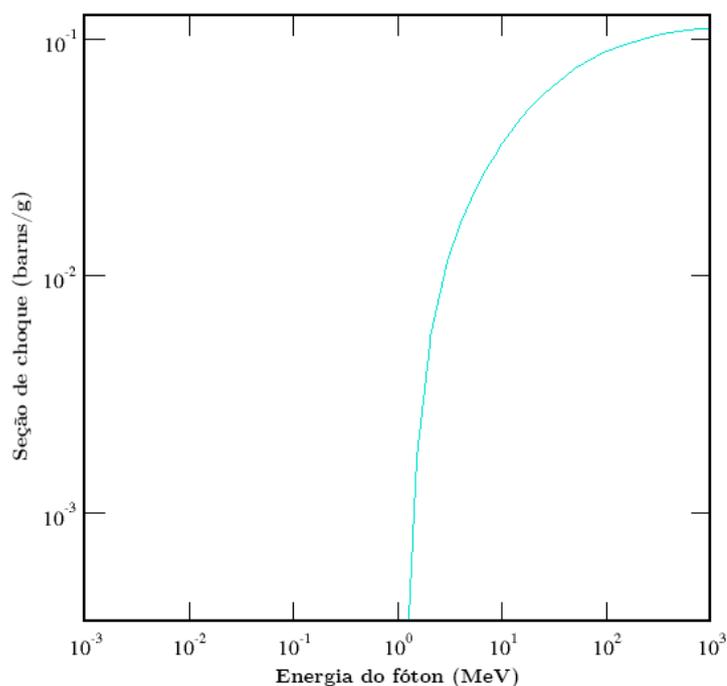


Figura 8: Seções de choque de produção de pares para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

### 2.1.3.4 Produção de tripletos

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

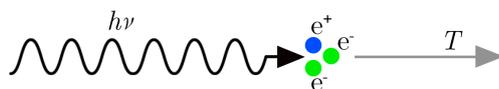


Figura 9: Ilustração da produção de tripletos.

A energia cinética média de cada uma das três partículas  $\bar{T}$ , em MeV, é dada por:

$$\bar{T} = \frac{h\nu - 1,022}{3} \quad (2.9)$$

A seção de choque para produção de tripletos  $\sigma_{PT}$  pode ser expressa em função da produção de pares:

$$\sigma_{PT} \approx \frac{\sigma_{PP}}{CZ} \quad (2.10)$$

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

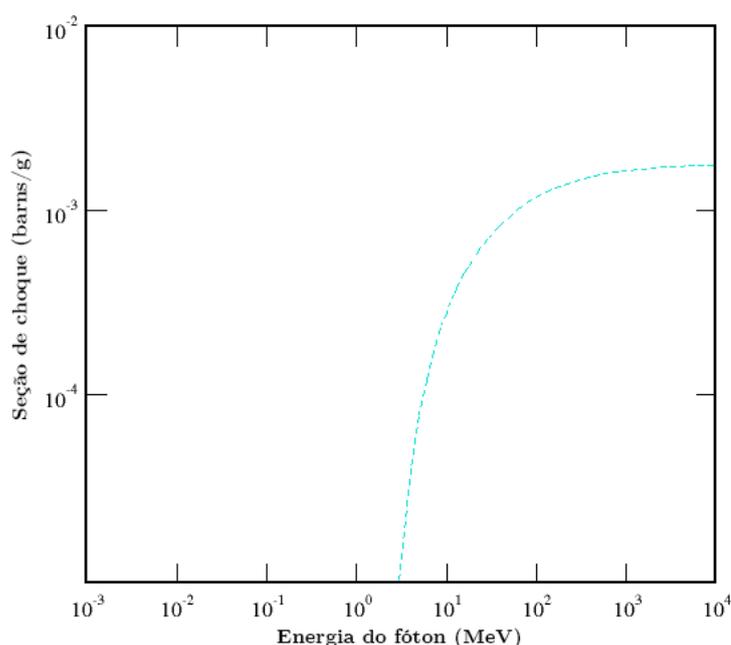


Figura 10: Seções de choque de produção de tripletos para ouro ( $Z = 79$ ). Gráfico traduzido e adaptado de Berger et al. (1999).

### 2.1.3.5 Atenuação exponencial de fótons

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

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

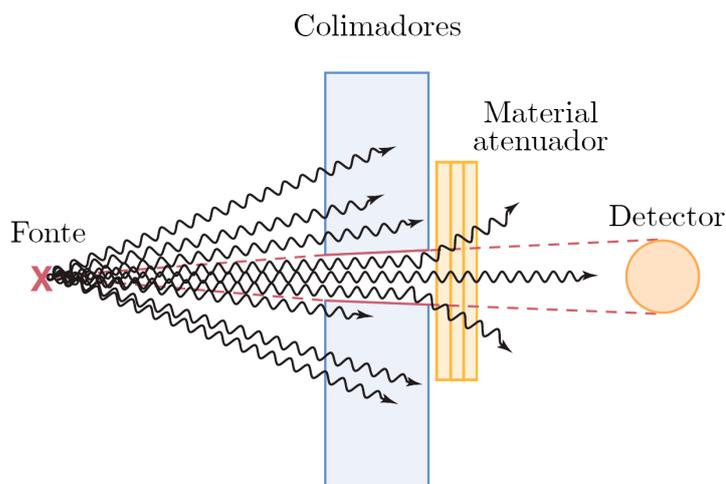


Figura 11: Esquema de irradiação de feixe estreito. Figura traduzida e adaptada de [Bushberg et al. \(2012\)](#).

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\mu t} \quad (2.11)$$

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

$$\mu = \rho \frac{N_A}{A} [\sigma_{ef} + \sigma_C + \sigma_{PP} + \sigma_T + \sigma_R] \quad (2.12)$$

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

### 2.1.4 Interações de partículas carregadas com a matéria

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

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

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

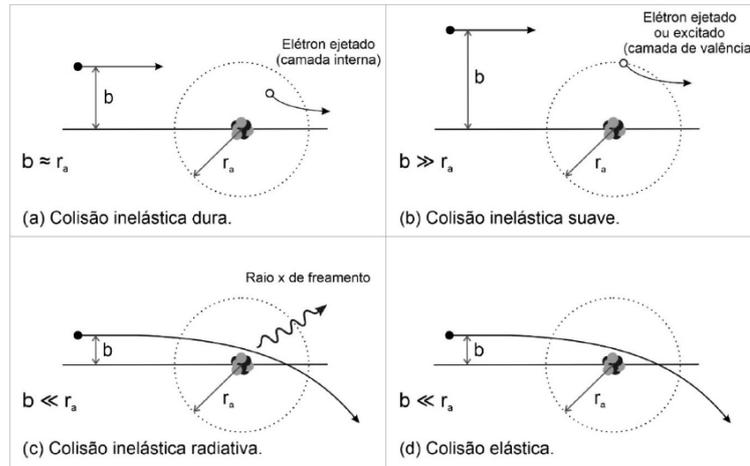


Figura 12: Diagrama simplificado das principais interações de partículas carregadas com o átomo, dependendo do parâmetro de impacto  $b$  relativo ao raio atômico  $r_a$ . Colisão inelástica *dura* (a) e *suave* (b), para  $b \approx r_a$  e  $b \gg r_a$ , respectivamente, e colisão inelástica radiativa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

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

$$\left(\frac{dT}{\rho dx}\right) = \left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_c + \left(\frac{dT}{\rho dx}\right)_r \quad (2.13)$$

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

### 2.1.4.1 Colisão elástica

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

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

### 2.1.4.2 Colisão inelástica suave

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

### 2.1.4.3 Colisão inelástica dura

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

### 2.1.4.4 Colisão inelástica radiativa

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

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

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

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

### 2.1.5 Alcance

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

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

$$\mathcal{R}_{CSDA} = \int_0^{T_0} \left( \frac{dT}{\rho dx} \right)^{-1} dT \quad (2.14)$$

Onde  $T_0$  é a energia inicial da partícula carregada e  $\mathcal{R}_{CSDA}$  possui a unidade de  $g/cm^2$  quando o poder de freamento  $dT/\rho dx$  é dado em  $MeV \text{ cm}^2/g$  e o integrando  $dT$  é dado em MeV.

### 2.1.6 Deposição de dose

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

$$D = \frac{d\epsilon}{dm} \quad (2.15)$$

Onde  $d\epsilon$  é o valor médio de energia transmitida para um volume infinitesimal  $dv$  no

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

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

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

$$D = \Phi \left( \frac{dT}{\rho dx} \right)_c \quad (2.16)$$

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

### 2.1.6.1 Porcentagem de dose profunda

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

$$PDP = \frac{D_d}{D_{d_0}} \quad (2.17)$$

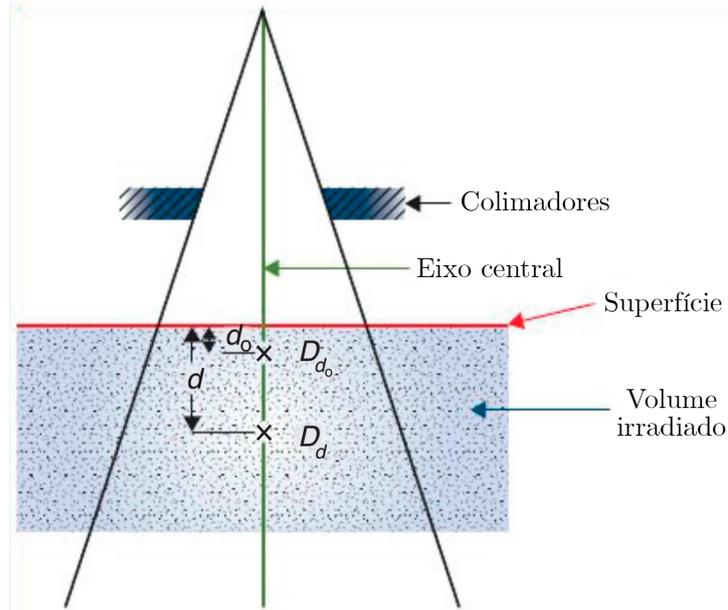


Figura 13: Esquema de irradiação para obter PDP. Figura traduzida e adaptada de [Khan e Gibbons \(2014\)](#).

## 2.2 Método de Monte Carlo

### 2.2.1 Lei dos Grandes Números

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{X}_n = E(X) \quad (2.18)$$

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

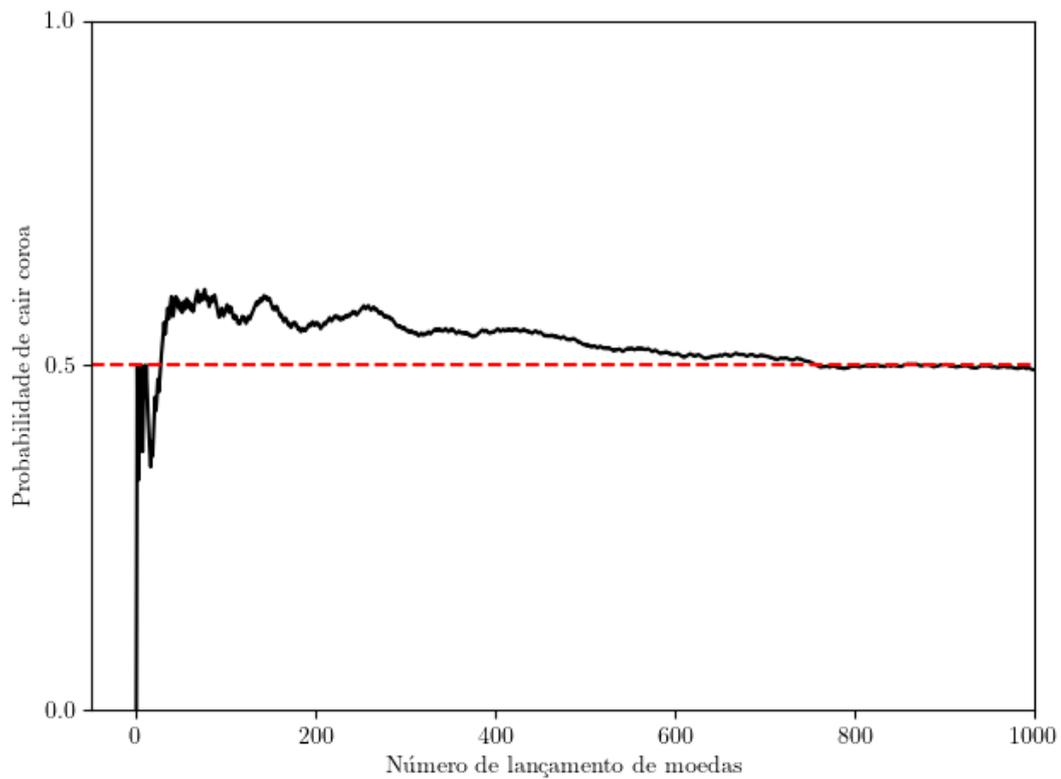


Figura 14: Probabilidade de lançamentos de moeda que resultaram em coroa à medida que o número de lançamentos aumenta.

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

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

### 2.2.1.1 TOPAS MC

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

de programação (SOUZA, 2022).

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

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

$$[Classe\ do\ Par\grave{a}metro] : [Nome\ do\ Par\grave{a}metro] = [Valor\ do\ Par\grave{a}metro]$$

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

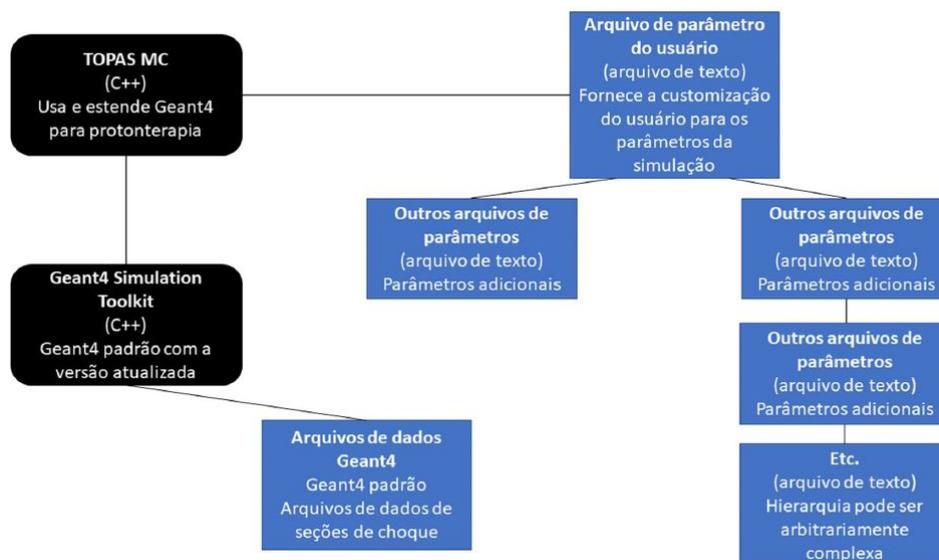


Figura 15: Estrutura do código de Monte Carlo (MC) TOPAS MC (SOUZA, 2022).

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

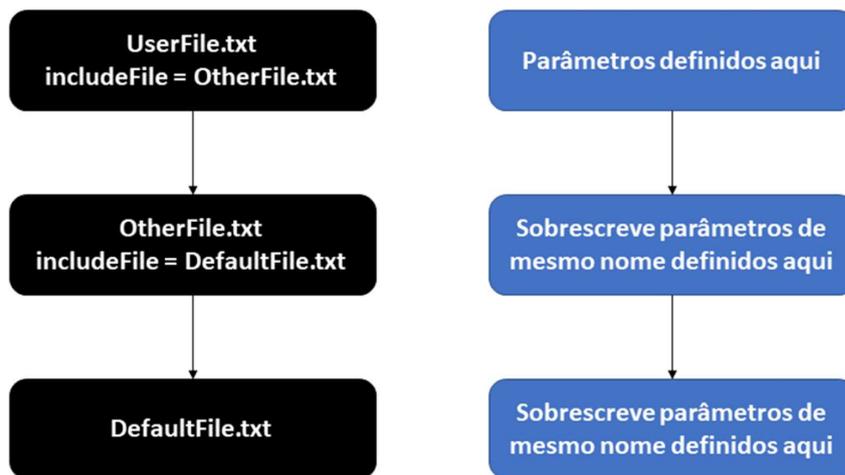


Figura 16: Representação do mecanismo de inclusão de arquivos (SOUZA, 2022).

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

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

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

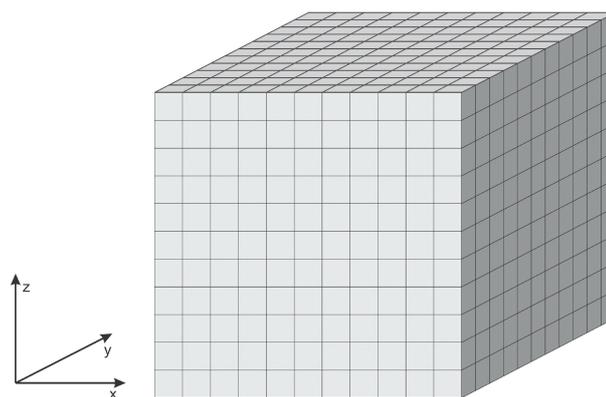


Figura 17: Volume cúbico subdividido em 11 *bins* nas direções x, y e z (NETO et al., 2022).

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

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

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

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

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

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

$$DP_S = DP_T \times \sqrt{N_h} \quad (2.19)$$

$$DP_M = \frac{DP_T}{\sqrt{N_h}} \quad (2.20)$$

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

# 3 MATERIAIS E MÉTODOS

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

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

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

## 3.1 TOPAS MC

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

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

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

```
#PLACA
d:Ge/Placa/HLZ      = 3 cm           # Metade do tamanho em Z (espessura)
s:Ge/Placa/Material = "G4_B-100_BONE" # Material da placa (osso)
```

(a)

```
#ÁGUA SÓLIDA
sv:Ma/AguaSolida/Components = 3 "Hydrogen" "Carbon" "Oxygen" # Componentes do material
uv:Ma/AguaSolida/Fractions  = 3 0.082 0.599 0.319 # Frações de cada componente
d:Ma/AguaSolida/Density     = 1.030 g/cm3 # Densidade total do material criado

#PMMA
sv:Ma/PMMA/Components      = 3 "Carbon" "Oxygen" "Hydrogen" # Componentes do material
uv:Ma/PMMA/Fractions       = 3 0.5998 0.3196 0.0806 # Frações de cada componente
d:Ma/PMMA/Density          = 1.180 g/cm3 # Densidade total do material criado
```

(b)

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

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

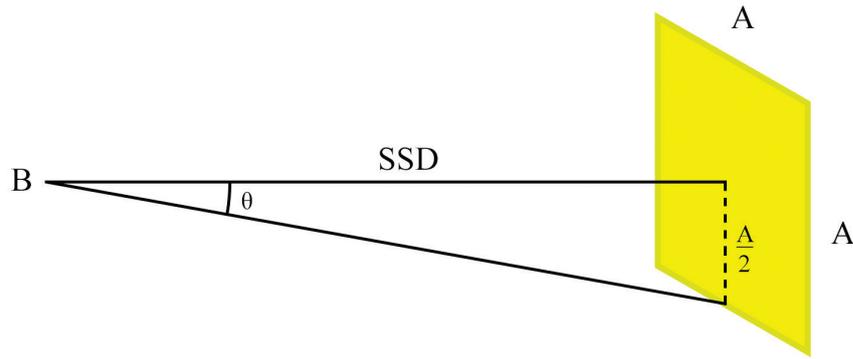


Figura 19: Esquema para definir tamanho de campo quadrado de uma fonte posicionada no ponto B (NETO et al., 2022).

$$BeamAngularCutOffX = BeamAngularCutOffY = \theta = \arctan\left(\frac{A/2}{SSD}\right) \quad (3.1)$$

Onde  $A$  é o tamanho da aresta do campo quadrado.

### 3.1.1 Validação do código

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

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

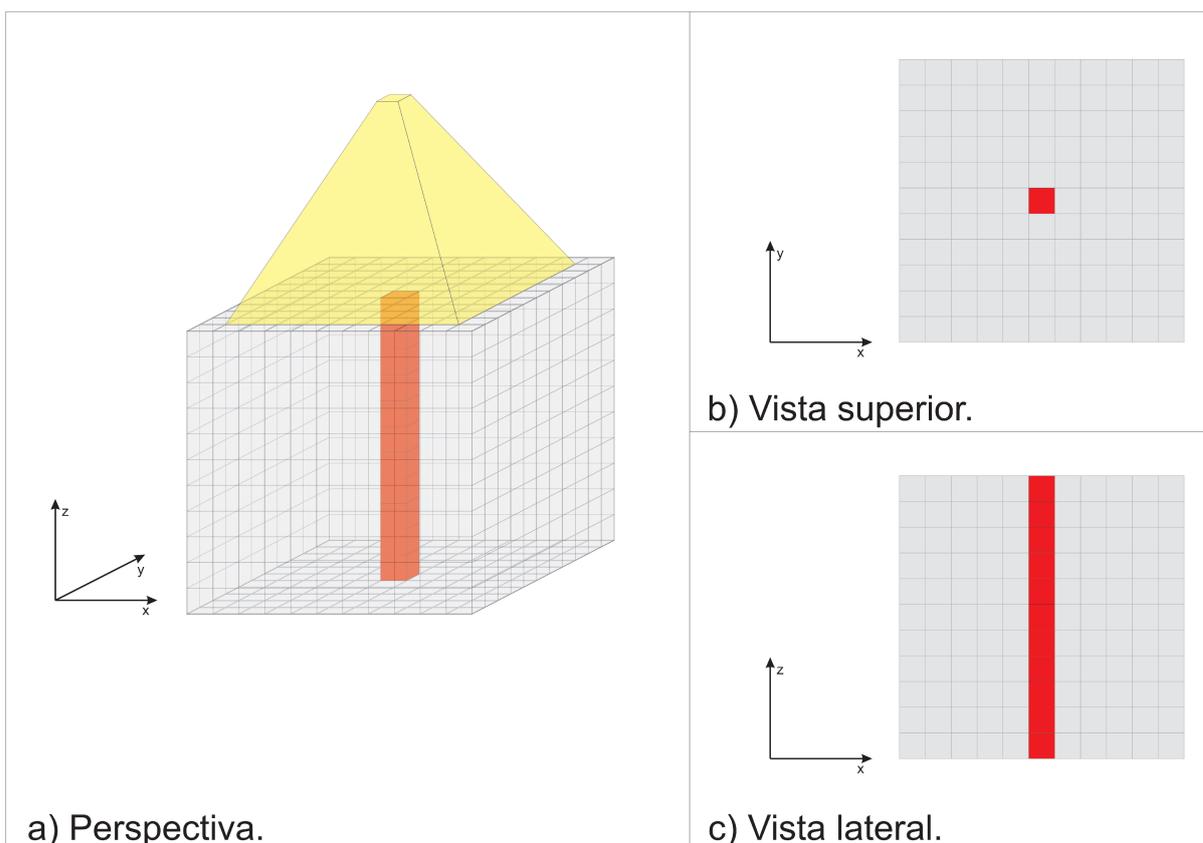


Figura 20: Ilustração esquemática da irradiação do simulador no TOPAS MC (NETO et al., 2022).

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

$$Z = \frac{|D_{máx}^T - D_{máx}^R|}{\delta_T} \quad (3.2)$$

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

### 3.1.2 Estatística

Para demonstrar a relação entre flutuação estatística e o número de histórias, foram realizadas simulações do espectro de 6 MV sobre o simulador de  $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$  com

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

### 3.1.3 Simulações didáticas

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

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

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

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

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

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

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

\*\*\*Energia do feixe monoenergético de elétrons.

As simulações foram idealizadas objetivando estudar os efeitos:

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

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

A água foi utilizada como material do meio homogêneo. No código, o material foi configurado para G4\_WATER, da própria biblioteca do GEANT4. No caso do meio heterogêneo, mais dois materiais foram adicionados: osso cortical e pulmão.

Para o osso cortical, também da biblioteca do GEANT4, o material escolhido foi G4\_BONE\_CORTICAL\_ICRP. Para o pulmão, foi verificada a necessidade de, além de estabelecer como material G4\_LUNG\_ICRP, alterar a densidade do material, uma vez que a densidade padrão estabelecida é apenas do tecido pulmonar, sem considerar o ar. A densidade do pulmão foi estabelecida como  $0,26 \text{ g/cm}^3$ , que é a densidade empregada para pulmão inflado pelo documento report 44 da comissão internacional de unidades e medidas de radiação (ICRU, 1989; NETO et al., 2022).

# 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

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

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

## 4.1 Validação do código

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

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

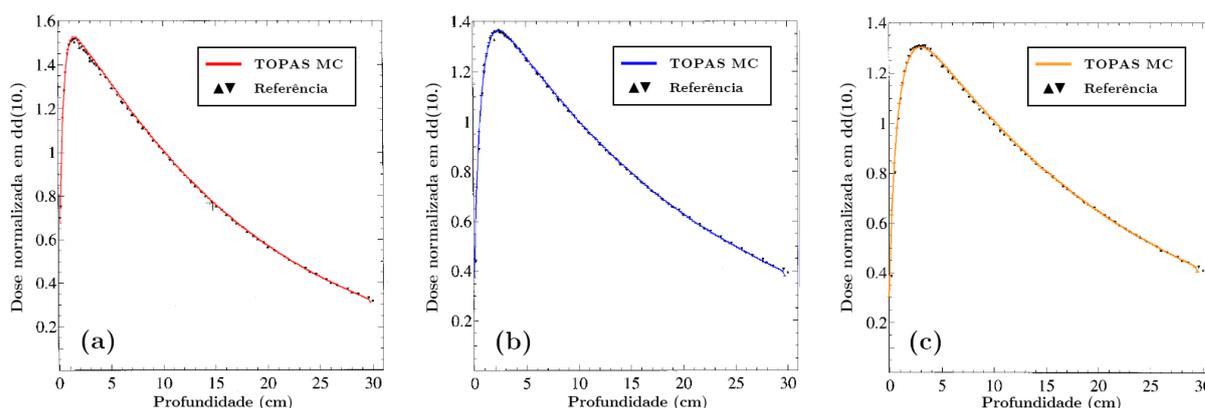


Figura 21: Validação do código para espectros de 6 (a), 10 (b) e 15 MV (c). O volume alvo simulado de  $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$  de água foi dividido em 15 *bins* em x, 15 *bins* em y e 120 *bins* em z.

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

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

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

## 4.2 Estatística

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

distintas de  $N_h$  oferece uma perspectiva abrangente sobre a dinâmica estatística envolvida nas simulações, contribuindo para uma interpretação mais robusta dos resultados obtidos.

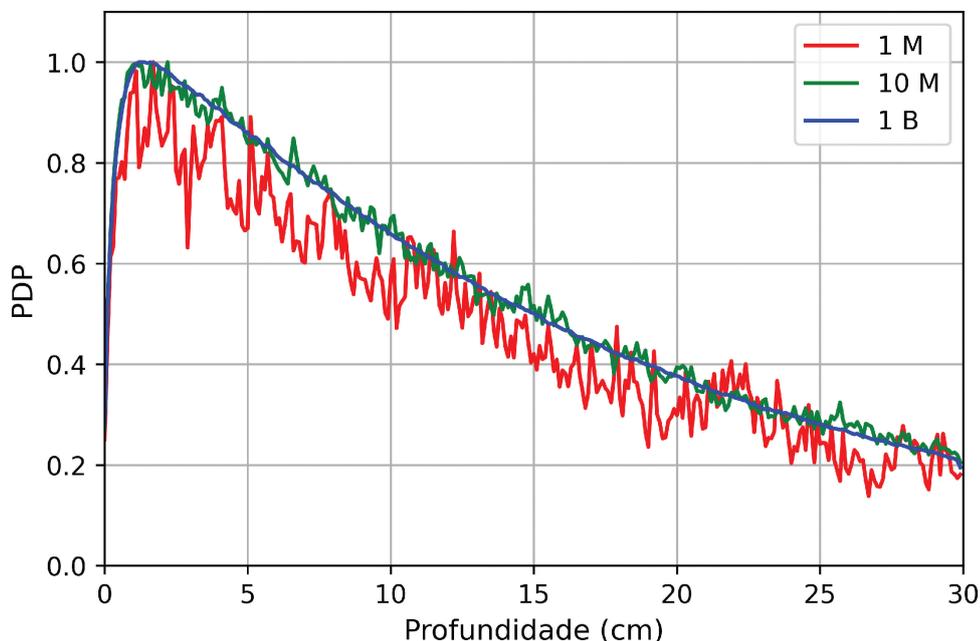


Figura 22: Resultados das simulações utilizando  $10^6$ ,  $10^7$  e  $10^9$  histórias (NETO et al., 2022).

A Figura 22 apresenta os resultados gráficos em curvas de PDP para comparação entre diferentes números de histórias para as mesmas condições de irradiação. Essa avaliação é necessária pois, ao se tratar de simulações Monte Carlo, a estatística das curvas é um parâmetro fundamental a ser considerado visto que está diretamente relacionado ao ruído da curva e sua compatibilidade com a curva experimental esperada. Evidencia-se, na Figura 22, a importância de uma escolha adequada do número de histórias a ser utilizado na simulação. Percebe-se que, com o aumento do número de histórias e, conseqüentemente, da densidade de histórias por bin, a curva de PDP torna-se mais suave, seguindo a Lei dos Grandes Números (veja 2.18). Contudo, cabe citar que, com o incremento do número de histórias, há a elevação da demanda computacional, influenciando, principalmente, no aumento do tempo de processamento da simulação (NETO et al., 2022).

### 4.3 Tamanho de campo

A Figura 23 mostra as curvas de PDP variando o tamanho do campo do feixe de fótons incidente de espectro de 15 MV. Cabe ressaltar que o campo  $10 \times 10 \text{ cm}^2$  foi o mais utilizado neste trabalho visto que é um campo de referência em dosimetria em

radioterapia (IAEA, 2001). Os campos  $5 \times 5$  e  $20 \times 20 \text{ cm}^2$  foram utilizados de modo a verificar, de modo comparativo, a influência do tamanho do campo na curva de PDP.

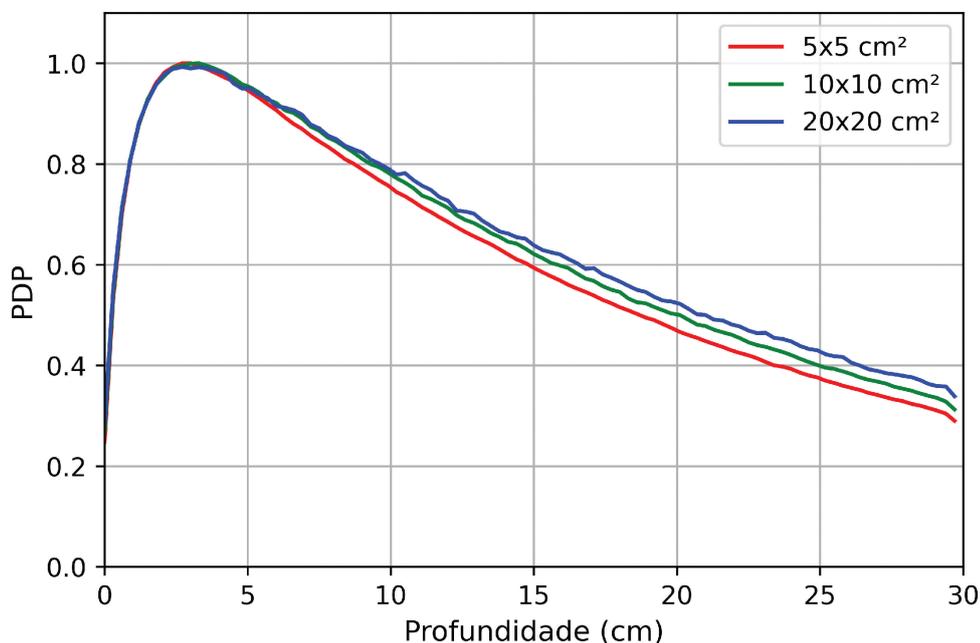


Figura 23: Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 15 MV (NETO et al., 2022).

Conforme o tamanho do campo aumenta, maior é o volume que contribuirá para o espalhamento de radiação, logo, maior a dose total. Para energias mais altas, este efeito é menos perceptível, visto que a seção de choque para espalhamento é inversamente proporcional à energia do feixe em questão, como visto na equação 2.5. Para feixes de energias mais baixas, o efeito é mais evidente, de acordo com a Figura 24. Portanto, a diferença de dose para diferentes tamanhos de campo depende da qualidade do feixe (NETO et al., 2022).

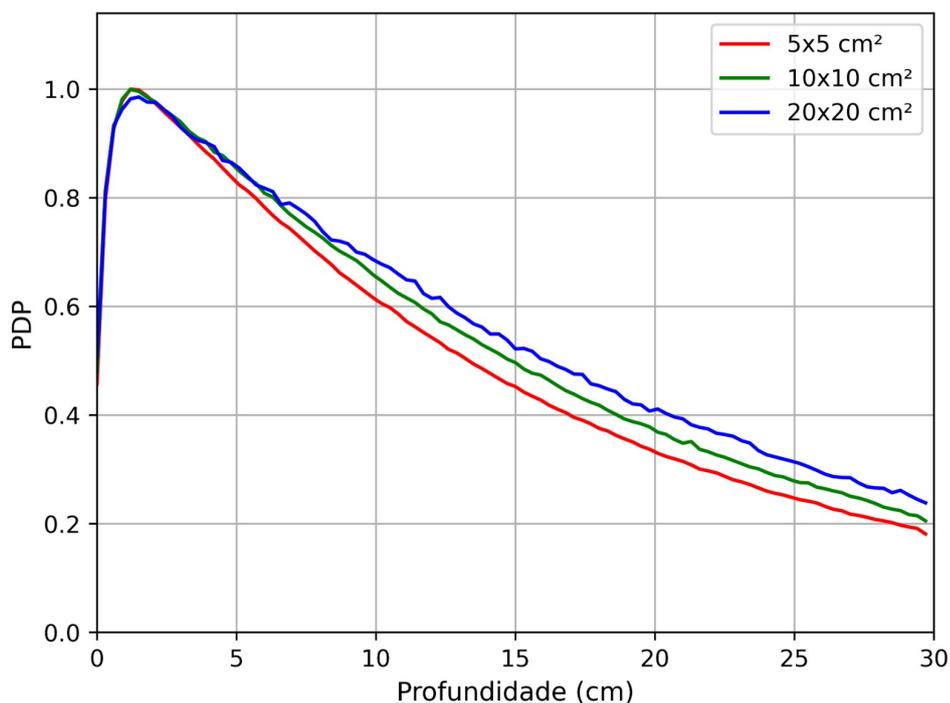


Figura 24: Gráfico de dose percentual por profundidade para comparação entre diferentes tamanhos de campo para um espectro de fótons de 6 MV (NETO et al., 2022).

Na radioterapia, a escolha do tamanho de campo depende do volume alvo (i.e. neoplasias, quelóides, entre outros) que será irradiado e dos órgãos adjacentes ao alvo que devem ser protegidos da radiação. Normalmente, são utilizados vários campos diferentes para o mesmo planejamento a fim de otimizar o dano no volume desejado e garantir a precisão do tratamento.

## 4.4 Fótons em meio homogêneo

A Figura 25 mostra as curvas de PDP para o espectro de fótons de 6, 10 e 15 MV no simulador de água. Tal simulação é relevante para evidenciar a influência da distribuição de energia e da energia efetiva do feixe incidente em um determinado meio homogêneo, principalmente, na profundidade de dose máxima e no decaimento da dose com a profundidade (NETO et al., 2022).

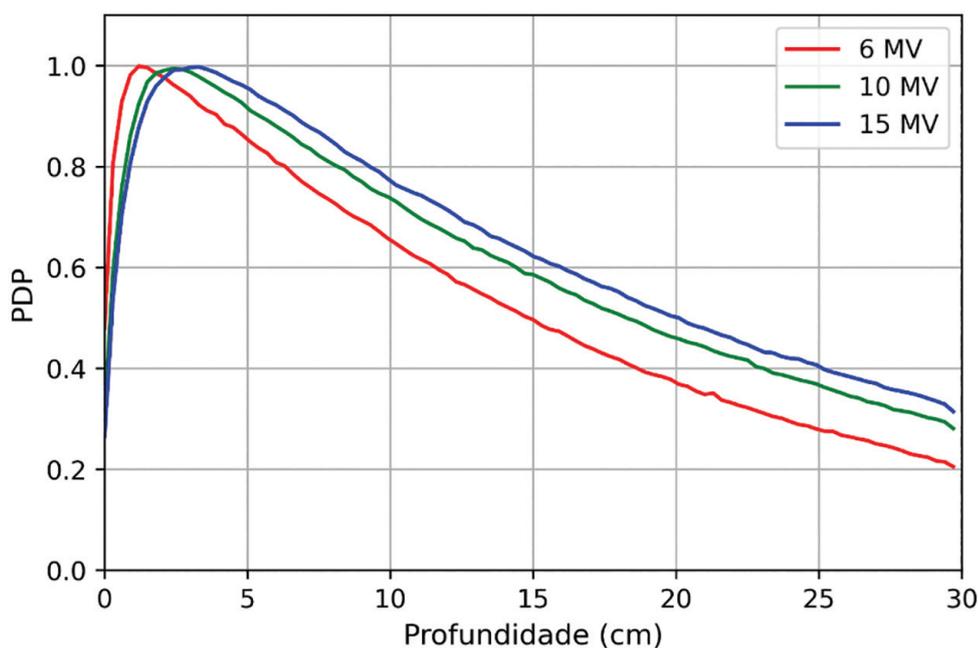


Figura 25: Gráfico de dose percentual por profundidade para espectros de fótons de 6, 10 e 15 MV. Os feixes incidiram em um bloco de água de  $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$  com um campo de  $10 \times 10 \text{ cm}^2$  (NETO et al., 2022).

Fótons são partículas que ionizam de forma indireta, pois não possuem carga. A sua curva de deposição se dá pela produção de elétrons secundários. A razão pela qual a dose máxima não ter sido depositada na superfície do simulador se dá pelo retroespalhamento de elétrons, ou seja, elétrons que escaparam do volume e não contribuíram para deposição de dose. Este retroespalhamento acontece até que o sistema alcance equilíbrio eletrônico, no ponto de dose máxima. A dose máxima é mais profunda de acordo com a energia efetiva do feixe. É possível observar na Figura 25 que a curva relativa ao feixe de 15 MV possui um pico mais deslocado para profundidades maiores que a de 6 MV. A partir da dose máxima, o comportamento da curva é quase exponencial (há contribuição de espalhamento), de acordo com a atenuação do feixe no simulador (veja 2.11) (NETO et al., 2022).

A relação entre energia do feixe de fótons e a profundidade de deposição de dose total é abordada na prática da radioterapia ao considerar a posição do volume alvo. Quanto mais profundo ele estiver no paciente, mais energético deve ser o feixe, a fim de atingir o alvo com a dose necessária de acordo com o que foi prescrito pelo médico.

## 4.5 Fótons em meio heterogêneo

A Figura 26 mostra as curvas de PDP das irradiações nos simuladores A composto por 5 cm de água, 3 cm de tecido ósseo cortical e 5 cm de água, respectivamente; e B composto por 5 cm de água, 3 cm de tecido pulmonar e 5 cm de água, respectivamente. Essa simulação tem por objetivo a verificação de como a dose se deposita em meios heterogêneos de maior e menor densidade que o meio inicial que, nesse caso, é a água (NETO et al., 2022).

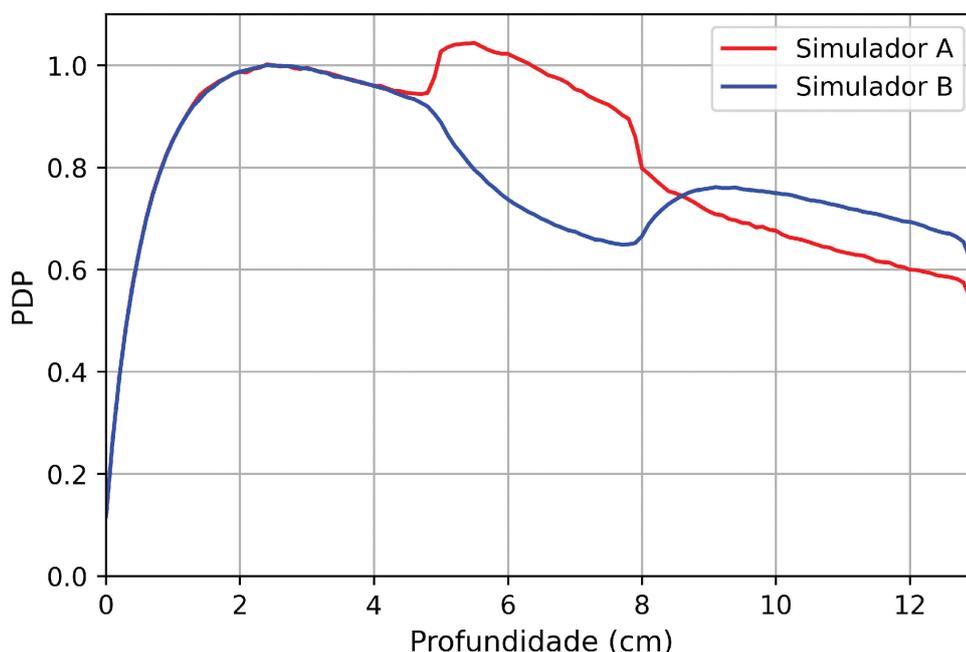


Figura 26: Gráfico comparativo de dose percentual por profundidade entre os simuladores A (5 cm de água/3 cm de osso cortical/5 cm de água) e B (5 cm de água/3 cm de pulmão/5 cm de água), ambos irradiados por um espectro de fótons de 15 MV com um campo de  $2 \times 2 \text{ cm}^2$  (NETO et al., 2022).

Os fatores relevantes para deposição de dose são energia de ionização e densidade do material irradiado. Estes parâmetros são listados na biblioteca de materiais do GEANT4. Na Figura 26 é possível notar a interface das placas pela diferença de dose. Na curva do simulador A, a deposição de dose aumenta da água para o osso e depois retorna a queda esperada. Osso cortical possui tanto uma densidade quanto uma energia de ionização maiores que a da água, cerca de 85% e 18% de diferença, respectivamente. No caso do simulador B, nota-se uma queda na dose depositada na placa de pulmão, uma vez que o pulmão apresenta uma densidade menor e uma energia de ionização ligeiramente maior que a da água, cerca de 41% e 3% de diferença, respectivamente (CERN, 2003; NETO et al., 2022).

Antigamente, os planejamentos de radioterapia consideravam os pacientes como um

grande volume de água, pois mais de 70% da composição do ser humano é água. A relevância de heterogeneidade de tecidos na distribuição de dose é de suma importância para garantir que a irradiação planejada seja compatível com a irradiação real, assegurando a acurácia do tratamento.

## 4.6 Elétrons

Figura 27 mostra as curvas de PDP para elétrons incidindo sobre o simulador cúbico de água. Essa simulação permite avaliar não só a diferença entre as curvas para elétrons de diferentes energias como também a diferença das curvas de PDP para elétrons e fótons, em comparação com os gráficos anteriores. Já os parâmetros de alcance para um feixe de elétrons de 16 MeV são mostrados na Figura 28 (NETO et al., 2022).

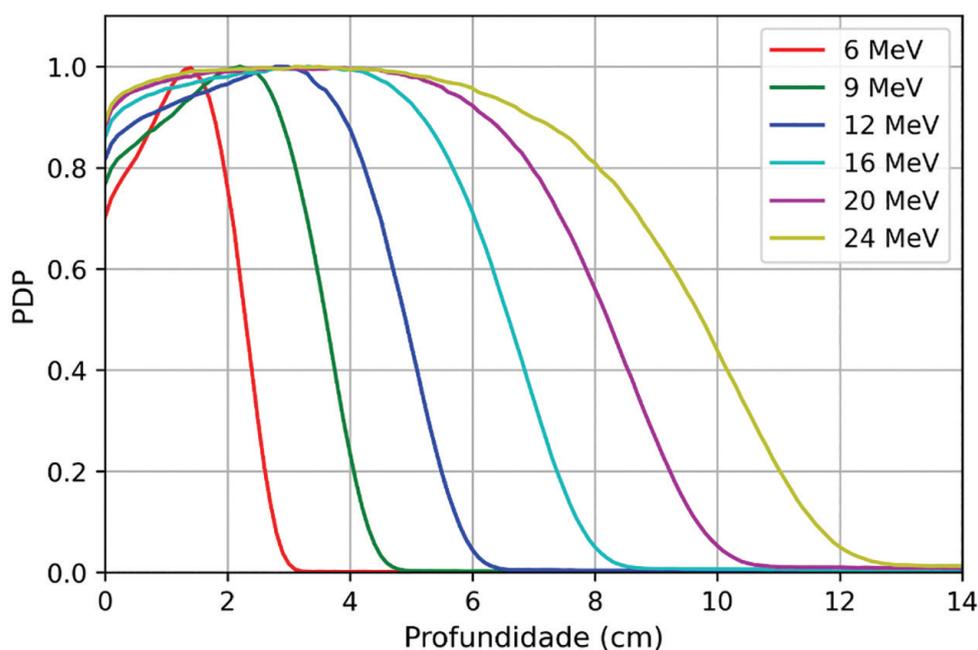


Figura 27: Gráfico de dose percentual por profundidade para espectros de elétrons de diferentes energias. Os feixes incidiram em um bloco de água de  $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$  com um campo de  $10 \times 10 \text{ cm}^2$  (NETO et al., 2022).

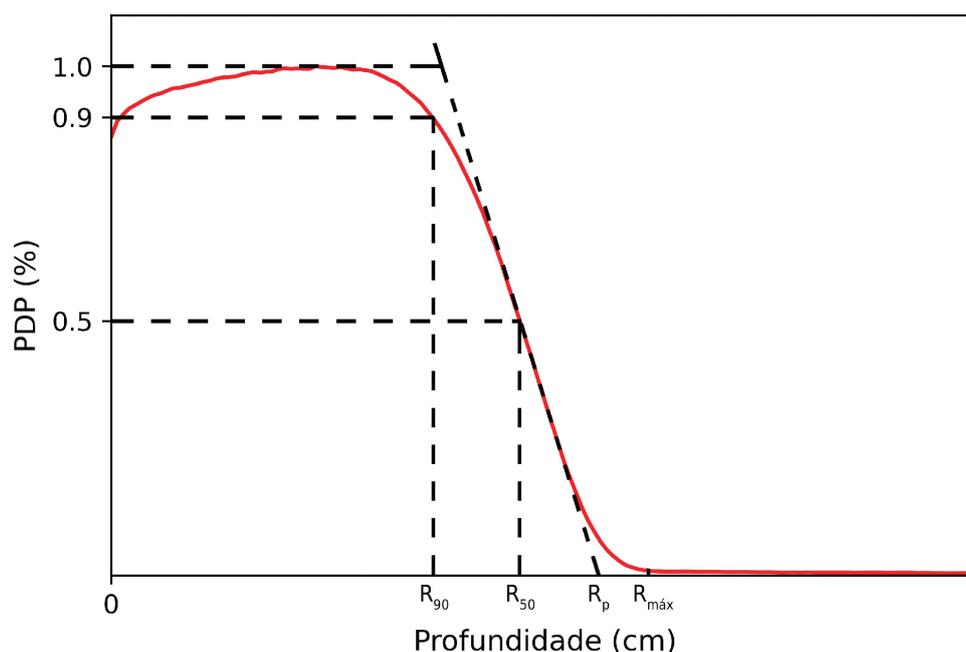


Figura 28: Parâmetros de alcance de um feixe de elétrons de 16 MeV. São eles: alcance equivalente a 90% da dose máxima ( $R_{90}$ ), alcance equivalente a 50% da dose máxima ( $R_{50}$ ), alcance prático ( $R_p$ ) e alcance máximo ( $R_{máx}$ ) (NETO et al., 2022).

Para um feixe de elétrons, é possível observar que existe uma relação direta e proporcional entre a profundidade de penetração das partículas e a energia das mesmas. Ressalta-se que além do deslocamento do ponto de dose máxima, há também um aumento da dose de entrada em função do aumento de energia do feixe. Adicionalmente, o aumento da energia leva a formação de um platô de dose que também pode ser observado nos resultados. Adicionalmente, comparados aos feixes de fótons, os feixes de elétrons apresentam um decréscimo da dose absorvida com a profundidade, para um mesmo meio, muito mais acentuado. Os parâmetros demonstrados nos resultados da Figura 28 são de suma importância para a caracterização do feixe, uma vez que a informação sobre o alcance é crucial para diversos aspectos clínicos e acadêmicos (NETO et al., 2022).

O decréscimo acentuado da deposição de dose total de feixes de elétrons é muito útil para tratamentos superficiais de radioterapia, como cânceres de pele e quelóides. Feixes de fótons para estes casos não costumam ser indicados pois, por mais que a deposição de dose máxima seja superficial, a taxa de decréscimo de dose é menor, gerando dano em regiões mais internas do paciente.

# 5 CONCLUSÕES

Simulação pelo método de Monte Carlo é uma ferramenta poderosa que pode ser empregada no processo de aprendizagem e ensino, maximizando o potencial de absorção do conteúdo abordado. Essa ferramenta já é amplamente utilizada na área de Física Médica e estudo de efeitos estocásticos da radiação. No contexto de aperfeiçoamento do ensino de Física das Radiações, o trabalho propõe a utilização de simulações pelo método de Monte Carlo a fim de otimizar a compreensão dos graduandos em relação aos processos de interação da radiação com a matéria na faixa de MeV. Esta nova abordagem permite um entendimento mais visual e aplicável de termos abordados no curso de Física das Radiações que, normalmente, são tratados de maneira pouco intuitiva. Além disso, o código pode ser uma plataforma para auxiliar o professor a planejar suas aulas. Nesse caso, o aluno é ainda mais encorajado a entender e até criar novas configurações físicas, além das propostas em aula e nesse trabalho. Estão sendo disponibilizados todos os arquivos de entrada, saída e programa desenvolvido nesse trabalho para facilitar a análise dos resultados das simulações para que o início da utilização do código de Monte Carlo possa focar na análise física das simulações, além da própria prática de utilização da ferramenta que pode ser aprimorada com o tempo (NETO et al., 2022).

Em contrapartida, por ser um modelo dependente de processamento computacional, o tempo de uma simulação pode variar de acordo com o computador que irá realizá-la. O código depende, principalmente, do processador do computador o qual irá realizar a simulação. Por exemplo, para uma das simulações de comparação de tamanhos de campo, o processador AMD Ryzen 7 5700G (3.8 GHz; 16 threads) demorou cerca de uma hora, enquanto o processador Intel i5-10210U (1.6 GHz; 8 threads) demorou cerca de três horas (NETO et al., 2022).

É importante mencionar que o domínio do código exige um conhecimento mínimo de Física das Radiações para utilizá-lo de maneira proveitosa. Logo, graduandos nos primeiros períodos do curso podem apresentar dificuldades com o método percorrido (NETO et al., 2022).

---

O TOPAS MC, entretanto, não possui fins unicamente educativos. O código é utilizado para todas as áreas de pesquisa em radioterapia e também possui algumas aplicações para radiodiagnóstico. Ademais, a ferramenta está em constante evolução e outras extensões - criadas por desenvolvedores ou outros usuários -, como aplicações nos estudos de dano de radiação em eletrônicos, física de partículas, física nuclear e astrofísica, serão futuramente implementadas ao código ([NETO et al., 2022](#)).

## **6 PERSPECTIVAS FUTURAS**

Para trabalhos futuros será apropriado aplicar as simulações de Monte Carlo para casos mais específicos de radioterapia. O TOPAS MC possui uma vasta biblioteca de componentes geométricos que fazem parte do cotidiano dessa área como aplicadores para braquiterapia, colimadores multilâminas, entre outros. Além disso, o código pode se tornar uma ferramenta de auxílio para validação de resultados experimentais.

É recomendado que, dada compatibilidade do TOPAS MC com tipos de arquivo utilizados no meio profissional - arquivos em formato DICOM, por exemplo -, uma análise didática de parâmetros comumente aplicados na radioterapia seja realizada pelo método de Monte Carlo.

# REFERÊNCIAS

- AGOSTINELLI, Sea et al. GEANT4—a simulation toolkit. **Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, Elsevier, v. 506, n. 3, p. 250–303, 2003.
- ANDREO, Pedro et al. **Fundamentals of ionizing radiation dosimetry**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2017.
- ATTIX, Frank Herbert. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. [S. l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 1986.
- BERGER, Martin et al. **XCOM: Photon Cross Section Database (version 1.2)**. en. [S. l.]: <http://physics.nist.gov/xcom>, 1999.
- BLENDER. **Blender - a 3D modelling and rendering package**. Stichting Blender Foundation, Amsterdam, 2018.
- BUSHBERG, J. et al. **The Essential Physics Of Medical Imaging**. [S. l.]: Lippincott Williams Wilkins, 2012.
- CERN. **Geant4 Material Database**. 2003. Disponível em: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/html/Appendix/materialNames.html#g4matrdb>. Acesso em: 20 dez. 2023.
- FADDEGON, B. et al. The TOPAS Tool for Particle Simulation, a Monte Carlo Simulation Tool for Physics, Biology and Clinical Research. **Physica Medica**, 2020.
- FORD, Richard; NELSON, Ralph. **The EGS code system: Computer programs for the Monte Carlo simulation of electromagnetic cascade showers (version 3)**. [S. l.], 2006.
- FREITAS, Marcelo Baptista; TERINI, Ricardo Andrade. A Formação em Física Médica no Brasil e no Mundo: da Graduação ‘a Pós-Graduação. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 13, 2019.
- GOORLEY, John et al. Initial MCNP6 release overview. **Nuclear technology**, Taylor & Francis, v. 180, n. 3, p. 298–315, 2012.

- GOULART, Luiza et al. Estruturação dos cursos brasileiros de Física Médica: um estudo comparativo. **Disciplinarum Scientia**, v. 19, 2018.
- HARTIKAINEN, Susanna et al. The concept of active learning and the measurement of learning outcomes: A review of research in engineering higher education. **Education Sciences**, MDPI, v. 9, n. 4, p. 276, 2019.
- IAEA. **Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy**. Vienna, 2001. (Technical Reports Series, 398).
- ICRU. **Tissue substitutes in radiation dosimetry and measurement**. [S. l.], jan. 1989. (Report 44).
- JAN, Sébastien et al. GATE: a simulation toolkit for PET and SPECT. **Physics in Medicine & Biology**, IOP Publishing, v. 49, n. 19, p. 4543, 2004.
- JENKINS, Theodore; NELSON, Walter; RINDI, Alessandro. **Monte Carlo transport of electrons and photons**. [S. l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 38.
- JÚNIOR, Valter José Coutinho et al. Avaliação dosimétrica de uma fonte radioativa didática de Am-241 por meio de simulação computacional utilizando o Método de Monte Carlo. **Anais do Congresso Brasileiro de Metrologia das Radiações Ionizantes**, 2020.
- JUSTINO, Paula et al. Aplicação do Método Monte Carlo na análise das doses de radiação emitidas por um equipamento de raios X didático. **Anais do XII Simpósio de Engenharia Biomédica - IX Simpósio DE Instrumentação E Imagens Médicas**, 2019.
- KHAN, F.M.; GIBBONS, J.P. **Khan's the Physics of Radiation Therapy**. [S. l.]: Lippincott Williams & Wilkins, 2014.
- KLEIN, Oskar; NISHINA, Yoshio. The Scattering of Light by Free Electrons according to Dirac's New Relativistic Dynamics. **Nature**, v. 122, p. 398–399, 1928.
- LEITE, Fabiane Valerio; TERINI, Ricardo A.; SANTOS, Josilene C. A Formação em Física Médica no Brasil: Conhecimentos Específicos Oferecidos nos Cursos de Graduação das Universidades Públicas. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 15, 2021.
- NETO, Ruy et al. Simulações de experimentos didáticos em física médica com TOPAS MC. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 45, 2022.
- OKUNO, Emico; YOSHIMURA, Elisabeth Matheus. **Física das Radiações**. [S. l.]: Oficina de Textos, 2016.

- PATER, Piotr; VALLIÈRES, Martin; SEUNTJENS, Jan. Hands-On Monte Carlo Project Assignment as a Method to Teach Radiation Physics. **Medical Physics**, v. 41, n. 6, p. 426–427, 2014.
- PERL, J. et al. TOPAS: An innovative proton Monte Carlo platform for research and clinical applications. **Medical Physics**, v. 39, p. 6818, 2012.
- PODGORSK, Ervin et al. Review of radiation oncology physics: a handbook for teachers and students. **Vienna, Austria: IAE Agency**, v. 19, p. 133, 2003.
- REBELLO, Wilson Freitas et al. Resultados da Implementação do Estudo do Método de Monte Carlo num Curso de Mestrado em Engenharia Nuclear. **Anais do Simposio Internacional sobre Educación, Capacitación y Gestión del Conocimiento en Energía Nuclear y sus Aplicaciones.**, 2015.
- SALVAT, Francesc; FERNÁNDEZ-VAREA, José M; SEMPAU, Josep et al. PENELOPE-2006: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. **Workshop proceedings**, v. 4, n. 6222, p. 7, 2006.
- SANTANA, Larissa Gabriela Oliveira de. **Tratamento de dados**. 2022. Disponível em: <<https://github.com/larissagabriela/Analise-de-dados-TOPAS-UFRJ/blob/main/README.md>>. Acesso em: 20 dez. 2023.
- SHEIKH-BAGHERI, Daryoush; ROGERS, David. Monte Carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the BEAM code. **Medical physics**, Wiley Online Library, v. 29, n. 3, p. 391–402, 2002.
- SOUZA, Felipe Marques Lucas de. **Protonterapia: avaliação de dose absorvida de nêutrons nas técnicas de espalhamento duplo passivo convencional e FLASH**. Set. 2022. Trabalho de conclusão do curso de Graduação em Física Médica – Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- TAUHATA, Luiz et al. **Radioproteção e dosimetria: fundamentos**. [S. l.]: CBPF, 2003.
- TURNER, James Edward. **Atoms, Radiation and Radiation Protection**. [S. l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2007.
- YORIYAZ, Hélio. Método de Monte Carlo: princípios e aplicações em Física Médica. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 3, n. 1, p. 141–149, 2009.