

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Cálculo da Dose de Radiação Através de Convoluções em
Meios Heterogêneos para Aplicações em Radioterapia

Luís Augusto Perles
Orientadora: Profa. Dra. Carola Dobrigkeit Chinellato

Maio de 2001

Agradecimentos

Agradeço ao Sérgio e a Rosângela da física médica do CEB por todo o apoio recebido. Ao pessoal da radioterapia do CAISM pela recepção e valorosas discussões: Márcio, Núria, José Garcia, Fernanda, André, etc. Ao Fred, por ter escaneado e enviado (por e-mail!) um valiosíssimo artigo. À Patrícia (USP - Ribeirão Preto) por possuir e emprestar o tal artigo.

Agradeço ao Wilson e ao Mário da Informática do CEB e do CCJDR do IFGW, respectivamente, pela valiosa ajuda.

Agradeço também ao professor Lúcio (DMA - IMECC) pela importante ajuda com as FFT's.

E, em especial, desejo expressar minha enorme gratidão aos meus dois orientadores: à professora Carola (DRCC - IFGW) e ao José Renato O. Rocha da radioterapia do CAISM pela dedicação e apoio dispensados.

Resumo

Nesta dissertação de mestrado apresentamos o estudo sobre uma técnica de convolução para o cálculo da distribuição da dose de radiação usada em teleterapia. Este método decompõe em três parcelas a distribuição da energia absorvida pelo meio: uma devida à dose do espalhamento primário, uma devida à dose do espalhamento secundário e uma terceira, devida aos espalhamentos de ordens superiores. Mostramos todo o desenvolvimento teórico do método de cálculo da dose de radiação por convoluções para meios homogêneos e heterogêneos, onde os tecidos moles são tratados todos como tendo a mesma seção de choque que a água. As heterogeneidades são tratadas como de densidades diferentes da água, porém com a mesma seção de choque da água. As funções de transporte de elétrons e fótons foram simuladas no EGS4.

Fizemos os cálculos para a energia do ^{60}Co e os resultados apresentaram uma boa concordância quando comparados a resultados experimentais e simulados para campos de até $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a uma profundidade de 26 cm . Com o aumento das dimensões do campo, a profundidade em que há confiabilidade reduz-se. Este fato se deve ao espaço limitado em que o programa EGS4 realiza as simulações dos transportes de fótons de altas ordens de espalhamento.

O programa desenvolvido para o cálculo da distribuição de dose de radiação nesta tese tem por objetivo servir de base para outros estudos e pesquisas relativas à aplicação deste método e também poderá ser usado no dia-a-dia da radioterapia após os devidos testes de confiabilidade.

Abstract

In this thesis we have applied the convolution techniques to calculate the three dimensional (3D) dose distribution to be used in teletherapy. The convolution method spans the total dose in three parts: one due to the energy released by charged particles produced at the first collisions, one due to the energy released by the first scattered photons, and the last one due to photons of higher order scattering. We have shown up the theoretical development for homogeneous and inhomogeneous media. Cross sections of tissues have been approximated to water like. Heterogeneities are supposed to have the same cross sections as water and their densities have been treated as weight for the dose computations. Electron and photon functions were simulated in a previous step using EGS4.

We have done the calculations for ^{60}Co energy and the results have shown good agreement with experimental data sets for fields less than $10 \times 10 \text{ cm}^2$ at 26 cm depth. For larger fields the depth of agreement was reduced. We have associated this fact to the limitation of simulation steps, during transport of photons of higher order scattering.

The aim of the software developed to calculate the radiation dose distribution in this thesis is to be the basis for other studies and researches related. The appliance in radiotherapy routine will be evaluated after confiability tests.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 A teoria do cálculo da dose por convolução para meios homogêneos e heterogêneos	5
2.1 A distribuição espacial da dose	5
2.2 O modelo teórico	7
2.3 A fluência	9
2.4 O cálculo da dose para meios homogêneos	10
2.4.1 A dose primária	10
2.4.2 A dose secundária	13
2.4.3 A dose de múltiplo espalhamento	15
2.4.4 A dose total	20
2.5 O cálculo da dose para meios heterogêneos	21
2.5.1 A dose primária	22
2.5.2 A dose secundária	22
2.5.3 A dose de múltiplo espalhamento	27
2.5.4 A dose total	30
3 Simulação por Monte Carlo	33
3.1 O programa de simulação EGS4	33
3.2 O processo de simulação	34
3.2.1 A simulação dos processos físicos	37

3.3	Simulando os núcleos de deposição de energia	39
3.3.1	O Método usado nas simulações	40
3.3.1.1	A geometria e as técnicas utilizadas	40
3.3.1.2	Os parâmetros da simulação	42
3.3.1.3	A contabilização da energia depositada	43
3.3.1.4	Núcleo primário	43
3.3.1.5	Núcleo secundário	43
3.3.1.6	Núcleo de múltiplo espalhamento	45
4	O Método Numérico	47
4.1	O cálculo computacional da dose	47
4.2	A matriz da fluência primária	48
4.2.1	A implementação computacional	49
4.3	Convolução via FFT	50
4.3.1	A Transformada de Fourier Rápida	51
4.3.1.1	Os Teoremas da Amostragem	52
4.3.2	Convolução de duas funções finitas	53
4.3.2.1	O deslocamento dos dados	53
5	Resultados e Discussões	55
5.1	Os núcleos de deposição de energia	55
5.1.1	O núcleo de deposição de energia primária	55
5.1.1.1	Os limites de resolução	56
5.1.2	O núcleo de deposição de energia secundária	58
5.1.3	O núcleo de deposição de energia devido ao múltiplo espalhamento dos fótons	61
5.2	Os cálculos da dose de radiação	61
5.2.1	Os testes em meios homogêneos	64
5.2.1.1	Comparação com as medidas feitas no CAISM	64
5.2.1.2	Comparação com o programa PLATO	79
5.2.2	Os testes em meios heterogêneos	79
5.2.2.1	Comparação com a simulação no EGS4	79
5.2.2.2	Comparação com o programa PLATO	81
6	Conclusões	85

A	Algumas definições usadas nesta tese	87
A.1	As definições dadas pelo ICRU	87
A.1.1	Radiometria	87
A.1.2	Coeficientes de interação	87
A.1.3	Dosimetria	89
A.2	Erro relativo e absoluto	90
B	Tabela de probabilidades de interações do fóton na água	91
C	Os testes e o código fonte do programa que realiza os cálculos 3D da dose	93
C.1	A estrutura do programa de convolução	93
C.1.1	O código fonte	94
C.2	Os Testes da Função de Convolução	108
C.2.1	Teste 1D	109
C.2.2	Teste 2D	109
C.2.3	Teste 3D	110
D	Alterações no programa XYZP para a geração dos núcleos de convolução	117
D.1	“Forçando” a primeira interação do feixe	117
D.1.1	Os núcleos de deposição de energia	119
E	O PEGS	121
F	O Formato Padrão dos Arquivos de Entrada e Saída	123
G	As máquinas usadas nas simulações e cálculos numéricos	125

Capítulo 1

Introdução

A radioterapia tem função importante no tratamento contra o câncer. O físico participa deste tratamento fazendo o planejamento da aplicação da radiação ionizante. O planejamento consiste em ajustar o tamanho do campo de radiação, a posição, direção e quantidade de feixes a serem usados. Para tomar estas decisões, o físico normalmente usa programas que calculam a distribuição tridimensional (3D) da dose de radiação dentro do corpo do paciente a fim de concentrar o máximo da dose no alvo (tumor) e o mínimo possível nos tecidos sadios. Estes procedimentos exigem um bom programa de cálculo da dose, porém nos deparamos com programas caros e que podem apresentar falhas. Este fato nos motivou a estudar os algoritmos usados para os cálculos 3D da dose e suas limitações. Nesta tese vamos apresentar um algoritmo e sua respectiva implementação computacional.

O que torna o cálculo da distribuição 3D da dose uma tarefa complicada é que não conseguimos equacionar o transporte de energia analiticamente. Para facilitar a compreensão da tese, vamos apresentar uma interpretação para a definição formal, dada no apêndice A, de dose de radiação e de uma outra grandeza também muito importante, o kerma¹.

Quando um fóton atravessa um meio material, ele interage com os átomos que formam este meio e lança partículas carregadas. O kerma é a quantidade de energia cinética por unidade de massa que a partícula carregada (elétron ou pósitron) recebe no instante da interação do fóton com a matéria. Basicamente, uma parte desta energia cinética será usada para a ionização dos átomos e moléculas do meio e a outra será irradiada por bremsstrahlung ou aniquilação de pares. A parcela do kerma que ioniza o meio chama-se kerma de colisão e a que irradia, de kerma de radiação.

Estas partículas carregadas que receberam um kerma de colisão irão ionizar a matéria

¹Kerma vem do inglês e significa *Kinetic Energy Released in the Medium*; o *a* foi adicionado apenas por questões fonéticas.

ao longo de sua trajetória. Suponha, então, um elemento de volume finito ΔV sendo atravessado por estas partículas carregadas. A dose de radiação é a parte do kerma de colisão de todas as partículas que atravessam ΔV e que é convertida em ionização do meio neste elemento de volume. É interessante notar que este ΔV pode estar sendo atravessado por partículas carregadas que foram geradas nele próprio e por outras partículas que foram geradas em elementos de volume vizinhos. A dificuldade em se determinar exatamente a dose está em descrever estes transportes das partículas carregadas (elétrons, pósitrons, etc) e também das neutras (fótons, nêutrons, etc.) [1, 2]. Sobre este tema discutiremos mais no capítulo seguinte.

Na prática, existem várias formas de se obter a distribuição aproximada da dose de radiação. A mais simples é a que se baseia no perfil de isodose medido na água e pode até ser feita graficamente, sem o auxílio de computadores [1]. Este é um método aproximativo antigo, porém ainda usado em determinados casos. Outra técnica é a simulação por Monte Carlo do transporte e das interações das partículas. Esta forma apresenta excelentes resultados, todavia o tempo computacional ainda é extremamente elevado. O método que será descrito e aplicado nesta tese é o de convolução da fluência do feixe de fótons que incide no meio absorvedor com núcleos de deposição de energia. A função destes núcleos é de espalhar o kerma de colisão lançado pela fluência [3, 4].

O objetivo desta tese é iniciar o projeto de desenvolvimento de um programa para o cálculo da dose de radiação através de convoluções para uso em teleterapia (radioterapia com fonte externa ao paciente). Inicialmente, o programa será aplicado em pesquisa, podendo ser adotado no planejamento dos tratamentos após os testes necessários.

A organização desta dissertação

No capítulo 2 detalhamos dois modelos teóricos para o cálculo da distribuição da dose de radiação, sendo um para meios homogêneos e outro para heterogêneos. Neste capítulo são apresentados os modelamentos dos núcleos de deposição de energia.

Tais núcleos serão simulados e as técnicas aplicadas são descritas no capítulo 3.

Descrevemos o método numérico usado para fazer a convolução no capítulo 4, onde aplicamos as técnicas de transformada de Fourier rápida.

Os resultados são apresentados no capítulo 5 onde comparamos o método de convolução com simulações e com um programa comercial usado no planejamento de radioterapia pelo CAISM (Centro de Assistência Integral a Saúde da Mulher, Unicamp), o Plato, da Nucletron [5].

Por fim, as conclusões encontram-se no capítulo 6, onde discutimos os caminhos do

projeto do programa iniciado nesta dissertação.

No apêndice A estão algumas das definições da ICRU (*International Commission on Radiation Units and Measurements*). Nos apêndices seguintes encontramos informações técnicas a respeito da programação e características dos equipamentos usados no desenvolvimento desta dissertação.

Capítulo 2

A teoria do cálculo da dose por convolução para meios homogêneos e heterogêneos

Estamos interessados em obter um modelo matemático para o cálculo da dose de radiação em meios heterogêneos que possa ser usado no planejamento de um procedimento de teleterapia por cobalto 60 (^{60}Co). Descreveremos neste capítulo dois modelos teóricos para o cálculo da dose usando um método que nos permite chegar a algumas integrais de convolução [3, 4].

No primeiro modelo tratamos apenas da aplicação da radiação a meios homogêneos, já o segundo modelo é uma extensão do primeiro para meios heterogêneos. Ambos os modelos são para radiação monoenergética, mas podem ser facilmente estendidos para raios-X, discretizando-se o espectro em faixas de energias e realizando os cálculos para cada faixa de energia em separado, e depois somando os resultados considerando o devido peso [6].

2.1 A distribuição espacial da dose

Vamos prosseguir com o estudo da composição da dose de radiação iniciado na introdução desta tese. Considere um elemento de volume discreto ΔV pertencente a um meio material, como mostrado na figura 2.1. Nesta figura vemos vários processos de interação da radiação com a matéria ocorrendo. Os fótons γ e γ'' interagem pelo processo Compton, γ' por efeito fotoelétrico e γ''' por produção de pares. Suponha que γ , γ'' e γ''' sejam os fótons provenientes de uma fonte de radiação monoenergética externa ao meio. A dose absorvida em ΔV será dada pela soma dos kermas de colisão das partículas carregadas, como esquematizadas na

2.2 O modelo teórico

Os modelos teóricos que vamos estudar aplicam-se principalmente a raios- γ com energia em torno de 1 MeV, em que o principal processo de interação da radiação com a água é o Compton (a tabela das probabilidades dos vários processos de interação de fótons com a água está no apêndice B).

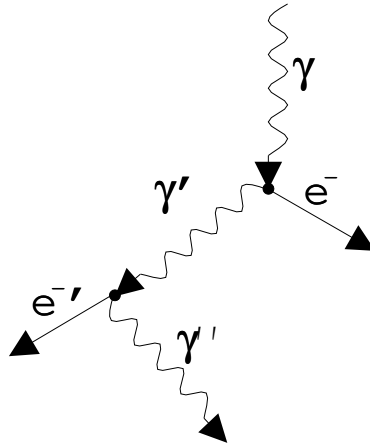


Figura 2.2: Esquema ilustrativo de uma seqüência de espalhamentos Compton.

Suponha uma história de um fóton γ de energia inicial E_0 que interage por processo Compton em um determinado meio absorvedor. O estado final deste sistema será composto por um fóton γ' de energia E' e um elétron e^- de energia K , como mostrado na figura 2.2. Este elétron irá depositar a sua energia cinética ao longo de sua trajetória e, eventualmente, emitir um ou mais fótons por bremsstrahlung (não esquematizado).

Continuemos a seguir o fóton γ' gerado no primeiro processo Compton. Este fóton poderia, novamente, sofrer uma interação Compton. Assim, o estado final deste segundo sistema fica sendo um fóton γ'' de energia E'' e um elétron e'^- de energia K' . Este elétron irá depositar a sua energia cinética em forma de ionização ao longo da sua trajetória e também poderia gerar algum fóton por bremsstrahlung.

O fóton γ'' termina sua história em mais alguns espalhamentos que podem, dependendo da sua energia, ser uma combinação dos efeitos Compton, produção de pares e fotoelétrico, podendo até mesmo sair do meio absorvedor em questão. Não estamos levando em conta o efeito Rayleigh por este não contribuir para a dose absorvida.

Esta história é a base do modelo proposto em [3, 4], que supõe que todas as interações dos fótons sejam Compton, como mostrado na figura 2.3.

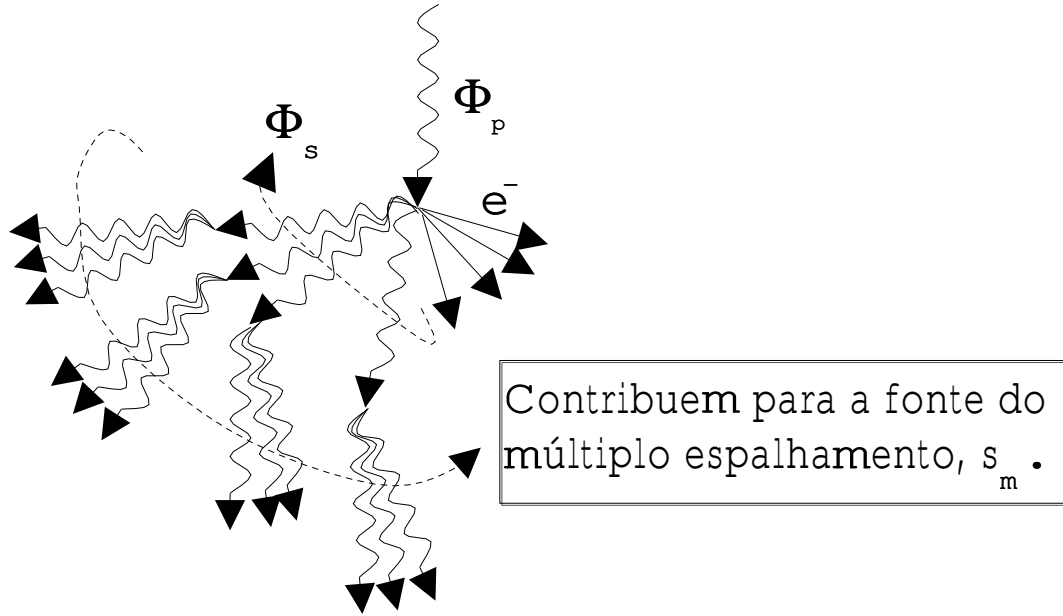


Figura 2.3: Este é o modelo teórico proposto pelo esquema da figura 2.2, agora com uma fluência associada aos fótons. Por simplicidade, não representamos os elétrons a partir da segunda interação.

A fluência de fótons é a razão entre o número de partículas e a área, como definido pela ICRU e apresentado no apêndice A. A fluência primária Φ_p é constituída pelos fótons que penetraram o meio absorvedor, são provenientes de uma fonte externa, e que ainda não interagiram.

O modelo a ser tratado nesta dissertação considera que os fótons da fluência primária interajam somente por efeito Compton. Após a primeira interação, a direção e a energia dos fótons são dadas pela seção de choque Compton. Neste passo não temos mais uma fluência unidirecional e monoenergética, o que pode dificultar um pouco a sua descrição matemática. Esta fluência secundária Φ_s de fótons está indicada na figura 2.3.

Consideramos novamente que os fótons que constituem a fluência secundária interajam por efeito Compton. Porém descrever a fluência após esta terceira colisão seria muito complicado e desprezar estes fótons significaria subestimar a dose total. Note que estes fótons, após mais algumas colisões, poderiam ser considerados como sendo provenientes de todo o meio e tendo direções aleatórias. Assim, a solução encontrada foi tratar os fótons que constituem a fluência após a terceira colisão como uma fonte a ser usada nos modelos de difusão, normalmente empregada para gases [3]. Desta forma, os fótons provenientes da terceira colisão serão tratados como a fonte s_m na equação da difusão de Helmholtz [7, 8].

Estes são os conceitos do modelo teórico que serão desenvolvidos e equacionados nas seções seguintes deste capítulo.

2.3 A fluência

Para sabermos a dose em uma determinada região no meio absorvedor precisaremos saber qual a quantidade e as características dos elétrons que estão atravessando esta região. Estes elétrons foram postos em movimento por fótons na região em questão e nas suas proximidades.

Considere um esquema onde encontramos um tanque semi-infinito contendo água como meio absorvedor e um feixe monoenergético de energia E_0 cuja fluência na superfície deste meio é denotada por Φ_0 , como esquematizado na figura 2.4. Seja Φ_p a fluência de fótons que atravessam o meio absorvedor, descrita como função da fluência da fonte na superfície Φ_0 como [6]:

$$\Phi_p(\vec{r}) = \Phi_0(\vec{r}_0) \cdot \frac{|\vec{r}_0|^2}{|\vec{r}|^2} \cdot \exp\left[-\int_{r_0}^r \mu(\vec{l}) \cdot d\vec{l}\right] \quad (2.1)$$

onde \vec{r}_0 é a distância da fonte à superfície do meio, também conhecida como SSD (*source to surface distance*), \vec{r} é a distância da fonte ao ponto em que estamos interessados em calcular a dose e $\mu(\vec{l})$ é o coeficiente de atenuação linear do meio no ponto \vec{l} . Note que nesta expressão para a fluência primária o coeficiente de atenuação linear μ depende da posição, portanto esta expressão de Φ_p aplica-se também a meios heterogêneos.

Se este feixe de fótons atravessa um meio de coeficiente de atenuação linear constante μ , então podemos simplificar a expressão anterior para ser usada nos cálculos para meios homogêneos, equação 2.2.

$$\Phi_p = \Phi_0(\vec{r}_0) \cdot \frac{|\vec{r}_0|^2}{|\vec{r}|^2} \cdot e^{-\mu \cdot |\vec{r} - \vec{r}_0|} \quad (2.2)$$

Para efeito de modelamento teórico da dose, não estamos considerando a divergência geométrica do feixe, pois em teleterapia esta divergência é tipicamente desprezível do ponto de vista da contribuição para a dose total. Voltaremos a discutir este assunto no capítulo 4.

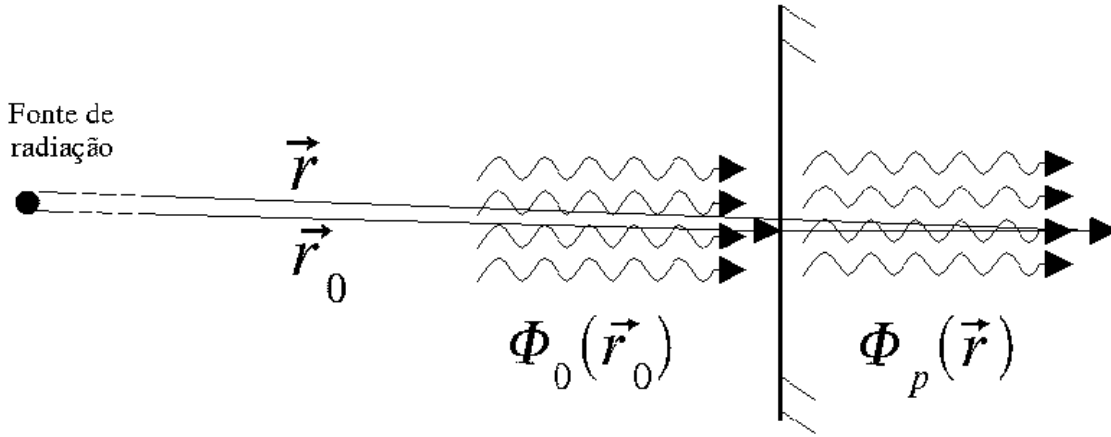


Figura 2.4: Esquema da geometria utilizada para descrever a fluência primária Φ_p em um ponto como função da fluência da fonte Φ_0 .

2.4 O cálculo da dose para meios homogêneos

2.4.1 A dose primária

A fluência primária apresentada na equação 2.2 transfere um kerma de colisão¹, chamado de kerma primário K_p , descrito por [1]:

$$K_p(\vec{r}_0) = \Phi_p(\vec{r}_0) \cdot \frac{\mu_{en}(E_0)}{\rho} \cdot E_0 \cdot C \quad (2.3)$$

onde μ_{en} é o coeficiente de absorção de energia atômico e ρ a densidade do material. μ_{en} é derivado do coeficiente linear como visto na equação 2.4, dado em cm^2/g [1, 2]. A fluência está em $fótons/cm^2$ e o kerma K_p está em gray (Gy). O fator C é usado para converter o kerma para gray, sendo $C = 1,602 \times 10^{-10} \left[\frac{Gy}{MeV/g} \right]$.

Temos ainda que

$$\mu_{en}(E_0) = \mu(E_0) \frac{\overline{E}_{tr}}{E_0} \quad (2.4)$$

onde \overline{E}_{tr} é a energia média transferida para o meio em forma de ionização.

Os elétrons resultantes da primeira colisão são chamados primários, assim a dose associada ao kerma da equação 2.3 será chamada de dose primária. Como apresentamos

¹A partir deste ponto vamos nos referir ao kerma de colisão apenas como kerma, exceto quando haja menção contrária.

anteriormente, um elétron primário irá depositar o seu kerma ao longo da sua trajetória, ionizando o meio. Durante o seu trajeto, o elétron sofre inúmeras colisões onde ocorrem trocas de energia e mudanças de direção aleatórias. Este fato dificulta o modelamento teórico da conversão do kerma em dose, mas sabemos que todo este kerma será convertido em dose absorvida em algum ponto, e para tanto vamos supor uma função $f(\vec{r})$ que faça esta distribuição. Do fato de que todos os elétrons que receberam um kerma primário serão termalizados em algum ponto do meio, escrevemos que :

$$\int \int \int_V f(\vec{r}') dV' = 1 \quad (2.5)$$

Assim a expressão para a dose primária será dada por[3]:

$$D_p(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \frac{\mu_{en}}{\rho}(E_0) \cdot E_0 \cdot c \cdot f(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.6)$$

Interpretamos a função $f(\vec{r} - \vec{r}')$ como a fração do kerma lançado em \vec{r}' que é transportado e transforma-se em dose no ponto \vec{r} . Vamos simplificar a equação anterior, para

$$D_p(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k_p(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.7)$$

A equação 2.7 representa a dose primária distribuída em todo o meio semi-infinito de água, onde $\Phi_p(\vec{r})$ é a fluência primária calculada em \vec{r} e $k_p(\vec{r} - \vec{r}')$ é o núcleo de deposição de energia primária. Se estas duas funções envolvidas nesta integral forem invariantes por deslocamento, a equação 2.7 será uma integral de convolução.

A função $f(\vec{r})$ pode ser conseguida por meio da simulação de Monte Carlo em um meio homogêneo [3]. Desta forma $f(\vec{r})$ será, assim como Φ_p , invariante por deslocamento, tornando a equação 2.7 uma convolução.

Embora um dos pontos tratados nesta tese seja a simulação por Monte Carlo dos núcleos de deposição de energia, por hora desejamos obter uma visão mais física do problema da conversão do kerma em dose. Por isso vamos buscar uma outra aproximação para a dose primária.

Para conseguirmos um núcleo de deposição de energia analítico, ainda que aproximado, vamos introduzir mais uma grandeza radiológica: o *stopping power*. Esta quantidade nos mostra a taxa em que as partículas carregadas perdem sua energia cinética dE para a ionização do meio ao longo de sua trajetória dx , e pode ser escrita assim: $\frac{dE}{dx}$. Dividindo esta expressão pela densidade ρ obtemos $\frac{dE}{\rho dx}$, chamado de *mass stopping power*, que é

aproximadamente independente da densidade do meio². O *stopping power* depende da seção de choque total do meio material e da energia cinética da partícula carregada em questão. Nas referências [1, 2] encontramos expressões analíticas para o *stopping power*.

Considere, então, um elemento de volume dV' com ρ_e elétrons por unidade de volume, onde as partículas carregadas são lançadas pelas interações Compton de um feixe de fótons monoenergéticos. Desejamos saber a dose absorvida por um determinado elemento de volume dV . Este elemento de volume centrado em \vec{r} está compreendido efetivamente em um ângulo sólido inversamente proporcional a $|\vec{r} - \vec{r}'|^2$. Considere também a seção de choque Compton que forneça o ângulo médio de saída do elétron, dada na equação 2.9. Podemos descrever o núcleo de deposição de energia primária, aproximadamente, por [4]:

$$k_p(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \cdot \frac{d\sigma'}{d\Omega'}(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{dE}{\rho dx}(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \quad (2.8)$$

sendo $d\sigma'/d\Omega'$ a seção de choque Compton para os elétrons e $\frac{dE}{\rho dx}$ o *stopping power* para os elétrons na água. O vetor $\vec{r} - \vec{r}'$ é a direção média de saída dos elétrons da interação Compton. Note que a seção de choque Compton e o *stopping power* apenas necessitam do ângulo θ' de saída do elétron. A seguir temos a expressão para a seção de choque Compton como função do ângulo médio de saída dos elétrons [9]:

$$\frac{d\sigma'}{d\Omega'}(\theta') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) \cdot \left[\frac{1}{1 + \alpha} \frac{(1 + \cos \theta) \sin \theta}{\sin^3 \theta'} \right] \quad (2.9)$$

$$\theta' = \cot^{-1} \left[(1 + \alpha) \tan \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (2.10)$$

$$\alpha = \frac{E_0}{m_0 c^2} \quad (2.11)$$

onde θ' é o ângulo do elétron que foi lançado pela interação Compton, e que se relaciona ao ângulo θ de saída do fóton pela equação 2.10, m_0 é a massa de repouso do elétron e c é a velocidade da luz no vácuo.

O que apresentamos aqui é uma aproximação analítica para o núcleo de deposição de energia primária considerando que todas as primeiras colisões são do tipo Compton e assumindo que, na média, a conversão do kerma em ionização ocorre de acordo como a expressão para o *stopping power*. É esperada uma boa concordância em determinadas energias como a do ⁶⁰Co, porém este modelo começa a falhar em energias mais altas.

²Não estamos considerando o “efeito densidade” [2].

2.4.2 A dose secundária

Quando estamos em um meio cujo número atômico efetivo é aproximadamente igual ao da água ($\bar{Z}_{H_2O} = 7,51$), o alcance prático de um elétron gerado por um fóton de 1MeV é de 0,329 cm [1]. Na introdução dissemos que a resolução espacial em que estamos trabalhando é de 0,5 cm, portanto maior que o alcance da maioria dos elétrons energéticos. Mesmo assim, fizemos o modelamento do transporte dos elétrons primários porque temos a intenção de que este modelo tenha boa concordância em energias maiores.

Porém é um pouco mais difícil fazer esta mesma estimativa para o caso dos fótons secundários, pois temos um espectro de energia de fótons após a primeira interação. Sabemos também que estes fótons secundários, possuem uma energia menor que os primários, e, portanto, os elétrons gerados por estes fótons secundários também terão um alcance prático menor que os primários. Este fato sugere que podemos desconsiderar o transporte dos elétrons secundários e apenas considerar que eles depositam toda sua energia na mesma célula em que interagiram. O modelamento teórico do núcleo de deposição de energia secundária fica então resumido ao transporte dos fótons através do meio absorvedor [3], o que nos remete novamente a uma convolução.

No esquema apresentado na figura 2.3 temos um espalhamento da fluência primária Φ_p por um processo Compton e observamos a geração da fluência secundária Φ_s . Seja um meio absorvedor cuja seção de choque Compton para fótons seja $d\sigma/d\Omega$. Neste meio considere um elemento de volume dV' onde haja ρ_e elétrons por unidade de volume. Então o número de fótons espalhados em um ângulo sólido $d\Omega$ é $\Phi_p \cdot \rho_e \cdot d\sigma \cdot dV'$. O número de fótons espalhados dN'_s provenientes de dV' como função do ângulo sólido $d\Omega$ fica

$$dN'_s = \Phi_p \cdot \rho_e \cdot dV' \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot d\Omega \quad (2.12)$$

Como estamos em um meio absorvedor e desejamos saber a fluência Φ_s que alcança um determinado elemento de volume dV em \vec{r} , devemos então fazer a atenuação exponencial da expressão anterior. Assim

$$dN'_s = \Phi_p \cdot \rho_e \cdot dV' \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \frac{dA}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\mu|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.13)$$

onde trocamos o $d\Omega$ do numerador por $\frac{dA}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}$, e μ é o coeficiente de atenuação linear do meio, que estamos considerando homogêneo.

Podemos então escrever uma fluência Φ'_s dependente do elemento de volume dV' como:

$$\frac{dN'_s}{dA} = \Phi_p \cdot \rho_e \cdot dV' \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \frac{e^{-\mu|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \quad (2.14)$$

$$\Phi'_s = \frac{dN'_s}{dA} \quad (2.15)$$

Portanto Φ'_s é uma fluência secundária diferencial e vamos escrevê-la assim: $d\Phi_s = \Phi'_s$.

Estamos interessados em saber a fluência total no elemento de volume dV apontado por \vec{r} , e portanto devemos integrar a fluência secundária diferencial em todo o espaço, conforme a equação 2.17.

$$\Phi_s = \iiint_V d\Phi'_s \quad (2.16)$$

$$\Phi_s(\vec{r}) = \iiint_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \rho_e \cdot \frac{dV'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \cdot e^{-\mu|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.17)$$

Simplificando a equação anterior, identificamos claramente o núcleo k'_s da convolução:

$$\Phi_s(\vec{r}) = \iiint_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k'_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.18)$$

$$k'_s(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \cdot \frac{dV'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot e^{-\mu|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.19)$$

O kerma secundário $K_s(\vec{r})$ é escrito como função da fluência secundária desta forma:

$$K_s(\vec{r}) = \Phi_s(\vec{r}) \cdot \frac{\mu'_{en}}{\rho} \cdot E_s \cdot C \quad (2.20)$$

onde $\frac{\mu'_{en}}{\rho}$ tem o mesmo significado que $\frac{\mu_{en}}{\rho}$ porém o sinal $'$ indica que deve ser calculado na energia E_s , sendo esta a energia média dos fótons que são espalhados no processo Compton [3].

Então, escrevendo o kerma secundário em termos da fluência primária, chegamos a:

$$K_s(\vec{r}) = \iiint_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.21)$$

$$k_s(\vec{r} - \vec{r}') = k'_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{\mu'_{en}}{\rho} \cdot E_s \cdot C \quad (2.22)$$

Como estamos considerando que os elétrons lançados por esta interação secundária estão

depositando toda a sua energia dentro da célula onde são gerados, a dose secundária em \vec{r} será igual ao kerma calculado neste mesmo ponto, e assim

$$D_s(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.23)$$

2.4.3 A dose de múltiplo espalhamento

Consideramos novamente que os fótons secundários irão interagir por efeito Compton e que esta segunda interação produzirá os fótons de terceira ordem. Como já citamos, não é muito interessante seguir cada uma das interações dos fótons, pois assim seríamos obrigados a truncar a série que compõe a dose total, incorrendo em um certo erro e sempre subestimando a dose total. Vamos considerar que os fótons de terceira ordem já não têm mais uma direção preferencial, e assim poderemos transportá-los de acordo com a teoria da difusão.

Quando inserimos uma molécula de gás com uma velocidade e direção conhecidas em um volume fechado contendo um certo gás, após algumas colisões não teremos mais como recuperar as condições iniciais desta partícula, isto é, não conseguiremos mais saber quais eram sua velocidade e direção iniciais. A equação que descreve este problema é a equação de Helmholtz [8]. Este problema é análogo ao transporte dos fótons de terceira ordem e superiores. Como o nosso problema não envolve o tempo, usaremos a equação estática de Helmholtz:

$$D\nabla^2\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) - \mu''_{en}\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) + s_m(\vec{r}) = 0 \quad (2.24)$$

onde D é o coeficiente de difusão, μ''_{en} é o coeficiente de absorção em massa para a energia média dos fótons para o múltiplo espalhamento³ E_{avg} , $s_m(\vec{r})$ é a função que descreve a fonte de fótons a serem transportados e $\tilde{\Phi}_m(\vec{r})$ é a fluência do múltiplo espalhamento que desejamos saber [3].

Vamos reescrever a equação da difusão para conseguirmos algumas quantidades de interesse físico, e assim temos

$$\nabla^2\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) - \frac{1}{L^2}\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) = -\frac{1}{D}s_m(\vec{r}) \quad (2.25)$$

onde L é conhecido como o comprimento de difusão e é dado por $L = \sqrt{\frac{D}{\mu''_{en}}}$.

O coeficiente de difusão D pode ser escrito em termos do coeficiente de absorção linear,

³ E_{avg} é obtida através da conservação da energia do fóton de entrada E_0 e dos fótons espalhados na primeira interação E_s

equação 2.26:

$$D = \frac{\mu_s''}{3\mu''^2} \quad (2.26)$$

sendo μ_s'' o coeficiente de espalhamento dado por: $\mu_s'' = \mu'' - \mu_{en}''$, em que μ'' é o coeficiente de atenuação linear, e todos são para a energia E_{avg} .

Para resolvermos a equação de Helmholtz e encontrarmos a fluência de múltiplo espalhamento $\tilde{\Phi}_m(\vec{r})$, precisaremos primeiro conhecer a função $s_m(\vec{r})$ que descreve o comportamento da fonte para o múltiplo espalhamento.

Os fótons que irão compor a função $s_m(\vec{r})$ serão aqueles que forem desviados da direção da fluência secundária $\Phi_s(\vec{r})$, isto é, serão os fótons que sofrerem uma terceira interação ao longo de sua trajetória $\vec{r} - \vec{r}'$, veja figura 2.5.

O número de fótons desviados da direção $\vec{r} - \vec{r}'$ pode ser escrito na forma:

$$\Delta N_\ell = \mu' \cdot N_\ell \cdot \Delta \ell \quad (2.27)$$

sendo $\Delta \ell = |\vec{r} - \vec{r}'|$ a distância percorrida pelo fóton, N_ℓ o número de fótons originados em \vec{r}' que seguem na direção apontada por $\vec{r} - \vec{r}'$ e μ' é o coeficiente de atenuação linear na energia E_s . Em seguida já escrevemos a sua forma diferencial,

$$dN_\ell = \mu' \cdot N_\ell \cdot d\ell \quad (2.28)$$

Sabendo que na direção $\vec{r} - \vec{r}'$ temos a fluência secundária Φ_s e que ela é dada pela razão entre o número de fótons N_ℓ que seguem nesta trajetória pela área A_ℓ , neste caso a área é a base do cone formado pelo ângulo sólido diferencial $d\Omega$ em torno da direção $\vec{r} - \vec{r}'$. Então escrevemos a equação 2.28 em função da fluência secundária, conforme a equação 2.29:

$$dN_\ell = \mu' \cdot \Phi_s \cdot A_\ell \cdot d\ell \quad (2.29)$$

$$N_\ell = \Phi_s \cdot A_\ell \quad (2.30)$$

Agora a multiplicação da área A_ℓ pela diferencial de comprimento do cone $d\ell$ será substituída pelo elemento de volume diferencial dV_ℓ e a equação 2.29 será escrita da seguinte maneira:

$$dN_\ell = \mu' \cdot \Phi_s \cdot dV_\ell \quad (2.31)$$

$$dV_\ell = A_\ell \cdot d\ell \quad (2.32)$$

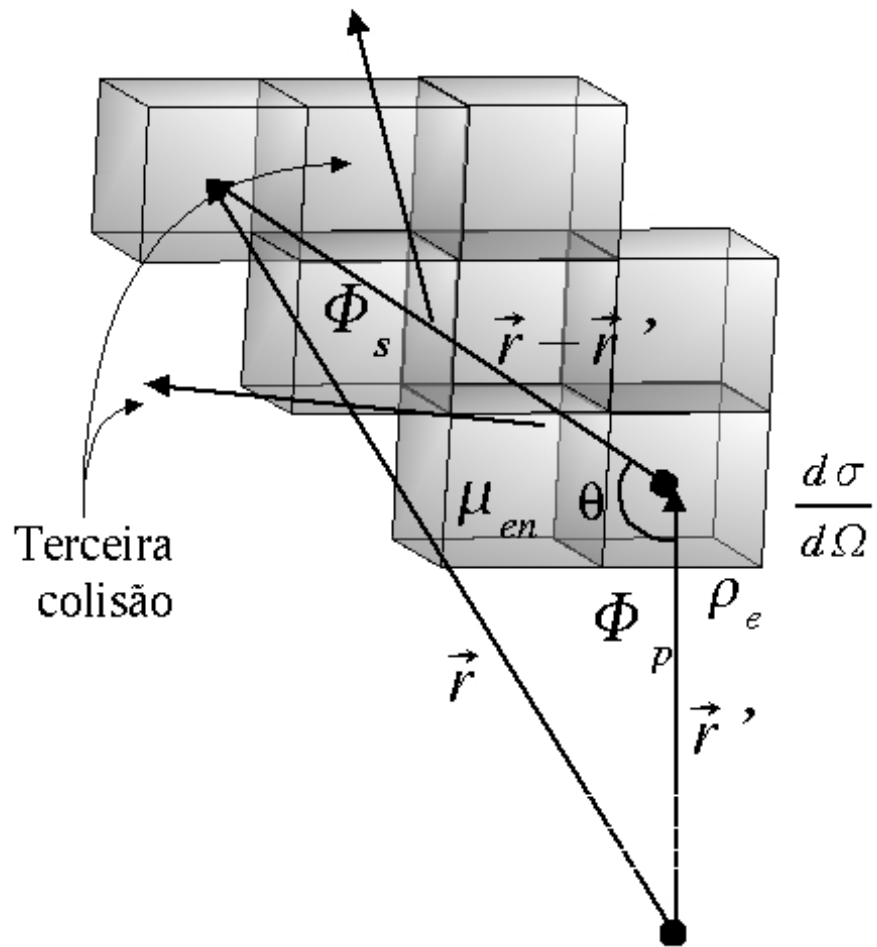


Figura 2.5: A trajetória dos fótons secundários e a ilustração dos fótons que foram desviados pela terceira colisão neste trajeto.

Reescrevendo a expressão 2.31 chegamos à fonte para o múltiplo espalhamento, conforme a equação 2.34:

$$s_m(\vec{r}) = \frac{dN_\ell}{dV_\ell}(\vec{r}) \quad (2.33)$$

$$s_m(\vec{r}) = \mu' \cdot \Phi_s(\vec{r}) \quad (2.34)$$

Note que a fonte para o múltiplo espalhamento tem dimensão de número de fótons por unidade de volume. Observe também que a equação 2.36 que descreve a fonte do múltiplo espalhamento é uma integral de convolução devido à fluência secundária.

$$s_m(\vec{r}) = \iiint_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \mu'_s \cdot k_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.35)$$

$$s_m(\vec{r}) = \iiint_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \tilde{k}_s(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.36)$$

onde $\tilde{k}_s(\vec{r} - \vec{r}')$ fica sendo o núcleo de convolução que compõe a fonte s_m .

Tendo a fonte para o múltiplo espalhamento de fótons a serem transportados, usamos a solução apresentada na referência [7] para a equação de Helmholtz,

$$\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) = \frac{s_m(\vec{r}) \cdot e^{-r/L}}{4\pi D r} \quad (2.37)$$

Veja que a fluência de múltiplo espalhamento $\tilde{\Phi}_m(\vec{r})$ depende dos fótons da fonte $s_m(\vec{r})$ localizada em \vec{r} . Como no nosso caso as fontes de fótons estão distribuídas em todo o meio material, devemos escrever $\tilde{\Phi}_m(\vec{r}) = d\Phi_m(\vec{r})$, onde $d\Phi_m(\vec{r})$, equação 2.38, é a diferencial da fluência de múltiplo espalhamento desejado. Assim a fluência de múltiplo espalhamento total Φ_m fica sendo

$$d\Phi_m(\vec{r}) = \frac{s_m(\vec{r}') \cdot e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/L} dV'}{4\pi D |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.38)$$

$$\Phi_m(\vec{r}) = \iiint_V \frac{s_m(\vec{r}') \cdot e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/L} dV'}{4\pi D |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.39)$$

Devemos ressaltar que a equação diferencial de Helmholtz que rege o processo de difusão vem da equação da lei de Fick, onde assumimos que o espalhamento de fótons é isotrópico. Esta não é uma boa aproximação para o caso do espalhamento Compton. Podemos contornar este problema usando um coeficiente de difusão D aproximado para este tipo de anisotropia

[7], conforme a expressão 2.40:

$$D \cong \frac{1}{3\mu_s'' \cdot (1 - \bar{\mu})} \quad (2.40)$$

com $\bar{\mu}$ sendo o cosseno médio do espalhamento dado por:

$$\bar{\mu} = \frac{1}{\mu_s''} \int_{4\pi} \frac{d\sigma_s''}{d\Omega}(\theta) \cdot \cos\theta \cdot d\Omega \quad (2.41)$$

onde $d\sigma_s''/d\Omega$ é a seção de choque diferencial Compton na energia E_{avg} .

De maneira análoga ao kerma secundário, teremos o kerma de múltiplo espalhamento, dado pela equação 2.44:

$$K_m(\vec{r}) = \Phi_m(\vec{r}') \frac{\mu_{en}(E_{avg})}{\rho} \cdot E_{avg} \cdot C \quad (2.42)$$

$$K_m(\vec{r}) = \int \int \int_V s_m(\vec{r}') \cdot \frac{e^{-|\vec{r} - \vec{r}'|/L(E_{avg})}}{4\pi \cdot D(E_{avg}) \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \frac{\mu_{en}(E_{avg})}{\rho} \cdot E_{avg} \cdot C \quad (2.43)$$

$$K_m(\vec{r}) = \int \int \int_V s_m(\vec{r}') \cdot k_m(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.44)$$

Também como no caso da dose secundária, podemos considerar que os elétrons gerados pelas interações destes fótons difundidos serão absorvidos localmente, na mesma célula em que foram lançados. Portanto a dose de múltiplo espalhamento será igual ao respectivo kerma, $D_m(\vec{r}) = K_m(\vec{r})$.

No entanto a equação para a dose de múltiplo espalhamento destoa das demais por não depender diretamente da fluência primária. Desejamos escrever esta última parcela da dose total também como função da fluência primária pois isto facilita os cálculos computacionais. Vemos na equação 2.36 que a fonte $s_m(\vec{r})$ depende da fluência primária, e substituindo-a na expressão para a dose de múltiplo espalhamento temos:

$$D_m(\vec{r}) = \int \int \int_V \left[\int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}'') \cdot \tilde{k}_s(\vec{r}' - \vec{r}'') \cdot dV'' \right] \cdot k_m(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.45)$$

Propomos a seguinte substituição de variáveis:

$$\begin{cases} \vec{r}' - \vec{r}'' & = & \vec{r}''' \\ \vec{r} - \vec{r}' & = & [\vec{r} - \vec{r}'''] - \vec{r}''' \end{cases} \quad (2.46)$$

e as respectivas mudanças nos diferenciais de volume:

$$\begin{cases} dV'' & \rightarrow & -dV''' \\ dV' & \rightarrow & -dV'' \end{cases} \quad (2.47)$$

Assim a dose de múltiplo espalhamento fica:

$$D_m(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi(\vec{r}'') \cdot \left[\int \int \int_V \tilde{k}_s(\vec{r}''') \cdot k_m([\vec{r}' - \vec{r}'''] - \vec{r}''') \cdot dV''' \right] dV'' \quad (2.48)$$

$$k_{s,m}(\vec{r} - \vec{r}'') = \int \int \int_V \tilde{k}_s(\vec{r}''') \cdot k_m([\vec{r}' - \vec{r}'''] - \vec{r}''') \cdot dV''' \quad (2.49)$$

Identificamos o núcleo de deposição de energia $k_{s,m}(\vec{r}' - \vec{r}''')$ como composto por dois outros núcleos de deposição de energia, conforme equação 2.49. A expressão final para a dose de múltiplo espalhamento fica sendo

$$D_m(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k_{s,m}(\vec{r}' - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.50)$$

2.4.4 A dose total

A dose total é composta pela soma das doses primária (eq. 2.7), secundária (eq. 2.23) e de múltiplo espalhamento (eq. 2.50):

$$D(\vec{r}) = D_p(\vec{r}) + D_s(\vec{r}) + D_m(\vec{r}) \quad (2.51)$$

Notamos que todas as doses parciais são integrais de convolução da fluência primária com um núcleo de deposição de energia diferente para cada uma delas. Este fato nos permite determinar um núcleo de deposição de energia total k_t que será formado pela soma dos núcleos primário, secundário e de múltiplo espalhamento:

$$k_t(\vec{r}) = k_p(\vec{r}) + k_s(\vec{r}) + k_{s,m}(\vec{r}) \quad (2.52)$$

Interpretamos k_t como a função que realiza o transporte e deposição da energia que compõe a dose. Esta função também é chamada de função de espalhamento de ponto (*Point Spread Function* - PSF).

Assim precisaremos realizar somente uma integral de convolução para saber a dose total,

conforme equação 2.53:

$$D(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot k_t(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.53)$$

2.5 O cálculo da dose para meios heterogêneos

Quando trabalhamos em radioterapia, e em especial na teleterapia, tratamos constantemente de meios heterogêneos. Podemos aproximar alguns tecidos do corpo humano do ponto de vista radiológico como sendo apenas água, pois o importante em radioterapia é justamente a forma como a radiação penetra, interage e é absorvida por este meio. A seção de choque desses tecidos, através do número atômico efetivo \bar{Z} , e sua densidade, são os fatores que influenciam nestes processos. Por isso consideramos tecidos como o muscular e o adiposo aproximadamente iguais à água.

materiais/tecidos	\bar{Z}	ρ [kg/m ³]
Ar (CNTP)	7,78	1,205
Água	7,51	1000
Muscular	7,64	1040
Adiposo	6,46	916
Poliestireno (C ₈ H ₈)	5,74	1044
Lucite (C ₅ H ₈ O ₂)	6,56	1180
Baquelite (C ₄₃ H ₃₈ O ₇)	6,27	1400
Ósseo	12,31	1650
Alumínio	13	2699

Tabela 2.1: A densidade e o número atômico efetivo de alguns materiais e tecidos [1].

Na tabela 2.1 apresentamos as densidades e \bar{Z} de alguns tecidos e materiais de uso comum na radioterapia [1]. Embora as densidades do ar, água, dos tecidos muscular e adiposo sejam diferentes entre si, os números atômicos médios são aproximadamente iguais. Note também que o número atômico efetivo do alumínio e do osso são bem próximos, mas bem maiores que o da água. Na prática, o alumínio é usado para fazer o papel do tecido ósseo em medidas dosimétricas e até em alguns cálculos de dose.

Nesta seção vamos apresentar um modelo teórico para o cálculo da dose em meios heterogêneos através de convoluções, aplicando uma correção de densidade entre os elementos de volume. Este modelo é totalmente baseado na teoria desenvolvida na seção anterior. A dose total será formada pela soma das doses primária, secundária e de múltiplo espalhamento. Será considerado também que os fótons interajam por efeito Compton a cada passo [4],

assim como no modelo sugerido na seção 2.2. Observando a tabela apresentada no apêndice B constatamos que este modelo teórico deve apresentar bons resultados na faixa de energia de 10MeV a 50keV.

2.5.1 A dose primária

O modelo para o cálculo da dose por convolução em meios heterogêneos faz uso da distribuição de densidades obtidas, por exemplo, através de tomografia computadorizada.

O teorema de Fano nos mostra que os tipos de processos envolvidos na interação da radiação com a matéria são independentes da densidade do meio, dependendo exclusivamente da sua composição [2]. Tendo em vista este teorema, uma expressão para a dose primária [4, 10, 11] fica:

$$D_p(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \tilde{\rho}(\vec{r}') \cdot k_p(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.54)$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}') = \frac{\rho(\vec{r}')}{\rho_{H_2O}} \quad (2.55)$$

sendo $\tilde{\rho}(\vec{r}')$ a densidade relativa entre a densidade do meio $\rho(\vec{r}')$ e a densidade da água ρ_{H_2O} . A fluência primária, definida na equação 2.1, contabiliza a atenuação exponencial de cada elemento de volume com sua respectiva densidade. O núcleo de deposição de energia está definido na equação 2.8 e é o mesmo usado para o cálculo da dose primária em meios homogêneos. Verificamos que esta expressão para a dose primária reduz-se à equação 2.7 para meios homogêneos quando a densidade relativa é unitária.

Esta correção de densidade tem o efeito de atenuar ($\tilde{\rho} < 1$) ou intensificar ($\tilde{\rho} > 1$) a dose depositada naquele elemento de volume, atuando como um fator de correção para a dose primária. Esta correção depende da mesma variável que a fluência primária, e assim consideraremos a fluência primária e a densidade relativa como uma função e o núcleo de deposição de energia como a outra função da convolução. No entanto, por questão de clareza, as expressões para a dose de qualquer espécie serão escritas no mesmo formato que a equação 2.54.

2.5.2 A dose secundária

Analogamente, para o desenvolvimento do modelo para a dose secundária em meios heterogêneos vamos nos basear no desenvolvimento da dose secundária para meios homogêneos, seção 2.4.2. A fluência secundária será escrita então da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \Phi_s(\vec{r}) &= \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \cdot \rho_e \cdot \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \\ &\quad \times \exp \left[- \int_{\ell=0}^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \mu'(\vec{\ell}) d\vec{\ell} \right] dV' \end{aligned} \quad (2.56)$$

Nesta fluência incluímos uma correção de $\tilde{\rho}(\vec{r}')$, e a atenuação exponencial, que na equação 2.17 dependia apenas da distância percorrida pelos fótons multiplicada pelo coeficiente de atenuação linear μ' , agora depende de uma integral sobre os coeficientes $\mu'(\vec{\ell})$, onde $\vec{\ell}$ representa o vetor distância percorrido pelo fóton. O $\mu'(\vec{\ell})$ usado é aquele para a energia E_s , que é a energia média dos fótons produzidos no espalhamento Compton [4].

O caminho para chegarmos a esta fluência é o mesmo que o apresentado na seção 2.4.2 apenas inserindo a função da densidade relativa e considerando que a queda exponencial depende de uma integral sobre os coeficiente lineares $\mu'(\vec{\ell})$.

Facilmente verificamos que a equação 2.56 se reduz à equação 2.17 quando estamos num meio de densidade relativa unitária e de coeficiente de absorção linear constante em todos os pontos do meio absorvedor.

A integral de convolução exige que as duas funções sejam invariantes por deslocamento espacial. Esta fluência secundária, tal como está na expressão 2.56, não pode ser escrita como uma convolução, pois a atenuação exponencial depende da posição. Como desejamos expressar esta função como uma convolução, faremos algumas aproximações.

Considere a diferença $\Delta\mu'(\vec{\ell})$ entre o coeficiente $\mu'(\ell)$ e o coeficiente de atenuação μ' , onde a ausência da indicação de posição deverá ser subentendida como sendo o coeficiente na água.

$$\Delta\mu'(\vec{\ell}) = \mu'(\vec{\ell}) - \mu' \quad (2.57)$$

Usando a equação 2.57, podemos escrever a expressão para a atenuação exponencial da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \exp \left[- \int_{\ell=0}^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \mu'(\vec{\ell}) d\vec{\ell} \right] &= \exp(-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ &\quad \times \exp \left[- \int_{\ell=0}^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Delta\mu'(\vec{\ell}) d\vec{\ell} \right] \end{aligned} \quad (2.58)$$

Vamos definir $\Psi(\vec{r} - \vec{r}')$ como:

$$\Psi(\vec{r} - \vec{r}') = \exp \left[- \int_{\ell=0}^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Delta\mu'(\vec{\ell}) d\vec{\ell} \right] \quad (2.59)$$

Nós agora podemos expandir Ψ em série Taylor como função de $\Delta r = |\vec{r} - \vec{r}'|$,

$$\Psi(\Delta r) = \Psi(0) + \frac{\partial\Psi}{\partial(\Delta r)} |\Delta r| + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial(\Delta r)^2} |\Delta r|^2 + \dots \quad (2.60)$$

Note que estamos usando a distância que o fóton viaja como variável da função Ψ e quando fazemos $\Delta r \rightarrow 0$, estamos dizendo que $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$, de modo que o coeficiente de atenuação acaba por ser calculado em \vec{r}' . Assim teremos

$$\Psi(0) = 1 \quad (2.61)$$

$$\left. \frac{\partial\Psi(\Delta r)}{\partial(\Delta r)} \right|_{\Delta r=0} = -\Delta\mu'(\vec{r}') \quad (2.62)$$

O resultado mostrado em 2.61 é conhecido como aproximação de ordem zero e em 2.62 como aproximação de primeira ordem. Portanto, a expressão de Ψ aproximada até primeira ordem fica sendo

$$\Psi(\vec{r} - \vec{r}') \cong 1 - \Delta\mu'(\vec{r}') \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \quad (2.63)$$

Substituindo a relação dada em 2.57 obtemos

$$\Psi(\vec{r} - \vec{r}') \cong 1 - [\mu'(\vec{r}') - \mu'] \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \quad (2.64)$$

Estamos considerando que o meio absorvedor tenha sempre a mesma seção de choque, mudando apenas a densidade. Desta forma usamos o escalonamento do livre caminho médio do fóton, baseado no teorema de Fano, para conseguirmos escrever a seguinte expressão para o coeficiente de atenuação linear

$$\mu'(\vec{r}') = \mu' \cdot \tilde{\rho}(\vec{r}') \quad (2.65)$$

Então a equação 2.64 passa a ser

$$\Psi(\vec{r} - \vec{r}') \cong 1 - \mu' [\tilde{\rho}(\vec{r}') - 1] \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \quad (2.66)$$

e substituindo Ψ na equação 2.56 teremos a seguinte expressão para a fluência secundária:

$$\begin{aligned}\Phi_s(\vec{r}) &= \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}) \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV' \\ &+ \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}) [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] (\vec{r}) \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \\ &\times \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \mu'(\vec{r} - \vec{r}') dV'\end{aligned}\quad (2.67)$$

Esta fluência secundária pode ser melhor compreendida se considerarmos cada integral que a compõe como uma função independente, assim

$$\Phi_s^0(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}) k_s^0(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.68)$$

$$k_s^0(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \quad (2.69)$$

$$\Phi_s^1(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}) [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] k_s^1(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.70)$$

$$k_s^1(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \times \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \mu'(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.71)$$

Conseqüentemente, a fluência secundária total fica

$$\Phi_s(\vec{r}) \cong \Phi_s^0(\vec{r}) + \Phi_s^1(\vec{r}) \quad (2.72)$$

onde o termo de ordem zero Φ_s^0 considera parcialmente as heterogeneidades do meio por conta da presença da fluência Φ_p e da densidade relativa $\tilde{\rho}$ em sua expressão, enquanto que o termo de primeira ordem Φ_s^1 compensa parcialmente o erro do termo de ordem zero nas heterogeneidades do meio absorvedor.

Para entender melhor o comportamento destes dois termos da fluência secundária imaginemos a equação 2.67 sendo avaliada através de uma interface entre dois meios. O primeiro tem densidade igual à da água e o segundo possui uma densidade relativa menor. Neste caso Φ_s^1 será positivo, porque $1 - \tilde{\rho}(\vec{r}') > 0$, acrescentando seu valor ao de Φ_s^0 para compor Φ_s , que sempre será positivo. Em uma outra situação, fótons passando da água para um meio de densidade relativa maior, a correção dada por Φ_s^1 será negativa, pois $1 - \tilde{\rho}(\vec{r}') < 0$, corrigindo

o valor da fluência secundária superestimada por Φ_s^0 dentro do meio onde $\tilde{\rho}(\vec{r}') > 1$.

Um raciocínio análogo pode ser feito em diversos pontos do meio, porém quando estivermos calculando a fluência secundária em elementos de volume cuja densidade é a da água, Φ_s^1 será sempre nulo, e a fluência secundária para o meio heterogêneo reduz-se à respectiva fluência para o meio homogêneo. Portanto a correção Φ_s^1 somente será não nula nos elementos de volume onde $\tilde{\rho}(\vec{r}') \neq 1$.

Observamos que as equações 2.68 e 2.70 que compõem a fluência secundária são também escritas em forma de convolução.

A dose secundária é escrita da mesma forma que a apresentada na seção 2.4.2 para meios homogêneos. O princípio de que a dose secundária é igual ao kerma secundário permanece válido sob o mesmo argumento: os elétrons não têm energia suficiente para deixarem o elemento de volume onde foram lançados. Da equação 2.20 para o kerma secundário escrevemos a expressão apropriada para a dose secundária em meios heterogêneos:

$$D_s(\vec{r}) = D_s^0(\vec{r}) + D_s^1(\vec{r}) \quad (2.73)$$

sendo a dose secundária de ordem zero dada por:

$$D_s^0(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') k_s^0(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.74)$$

$$k_s^0(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \times E_s(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\mu'_{en}}{\rho}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.75)$$

e a parcela de correção de primeira ordem da dose secundária dada por:

$$D_s^1(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] k_s^1(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.76)$$

$$k_s^1(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} E_s(\vec{r} - \vec{r}') \times \frac{\mu'_{en}}{\rho}(\vec{r} - \vec{r}') \mu'(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.77)$$

A interpretação para os termos de ordem zero e primeira ordem que compõem a dose secundária é dada pela fluência secundária. Mas note que, por se tratar de uma expansão em série, o termo de primeira ordem é menos significativo que o de ordem zero.

Desta forma, temos uma expressão para a dose secundária escrita na forma de convolução

que considera, ainda que aproximadamente, as correções devido às variações de densidade do meio.

2.5.3 A dose de múltiplo espalhamento

Um modelo para o cálculo da dose por convolução em meios heterogêneos, em princípio, deve ser o mais abrangente possível, contemplando as mais variadas formas e dimensões das estruturas do corpo humano. Portanto, não é interessante criar modelos para a distribuição da dose onde as heterogeneidades sejam tratadas através de geometrias simples tais como esferas, cilindros, ou qualquer outra que facilite o modelamento teórico. Necessitamos de um modelo abrangente que apresente uma precisão boa e previamente conhecida.

Resolver a equação da difusão apresentada na seção 2.4.3 considerando as heterogeneidades do meio significa impor condições de contorno à equação diferencial de Helmholtz. Como é extremamente difícil prever a geometria dessas estruturas, vamos aproximar a solução desejada para a de meios homogêneos [4], equação 2.37. Este fato nos remete diretamente à fluência de múltiplo espalhamento para meios homogêneos, equação 2.39, que então será adotada para os meios heterogêneos.

Notamos que esta fluência Φ_m depende diretamente da fonte s_m para o múltiplo espalhamento, e esta fonte depende da fluência secundária Φ_s , onde, nesta seção, usaremos a respectiva fluência para meios heterogêneos, conforme a equação 2.56.

Porém, analisando cuidadosamente a dedução da expressão para a fonte s_m , percebemos que podemos fazer algumas correções de densidade. O coeficiente de atenuação linear μ' usado na equação 2.27 e admitido constante agora depende do trajeto percorrido pelos fótons secundários, e pode variar de acordo com a densidade. Partindo deste princípio e refazendo os cálculos da seção 2.4.3 chegaremos à seguinte expressão para a fonte de múltiplo espalhamento para meios heterogêneos:

$$s_m(\vec{r}) = \tilde{\rho}(\vec{r}) \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \tilde{k}(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.78)$$

$$\tilde{k}(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp\left[-\int_{\ell=0}^{|\vec{r}-\vec{r}'|} \mu'(\vec{\ell}) d\vec{\ell}\right]}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \mu'_s(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.79)$$

A fonte para o múltiplo espalhamento, equação 2.78, é escrita como uma integral semelhante à da fonte para meios homogêneos, equação 2.36. Notamos a dupla utilização da densidade relativa $\tilde{\rho}$. A que está dentro da integral modifica a fonte de fótons espalhados atuando diretamente onde eles são gerados, isto é, agindo sobre o coeficiente de espalhamen-

to Compton μ'_s . A densidade relativa que está fora da integral modifica a fonte, portanto, se a densidade relativa em \vec{r} é menor que a unidade, a probabilidade de haver uma interação destes fótons da fonte também será reduzida. No núcleo de convolução mostrado na equação 2.79 usamos o coeficiente de espalhamento Compton [4], e não o de atenuação linear, como usado na seção 2.4.3, por ser mais preciso, contabilizando apenas os fótons que são espalhados na direção $\vec{r} - \vec{r}'$.

Contudo a equação 2.78 não é uma integral de convolução pois o seu núcleo, equação 2.79, não é invariante por deslocamento. Contornamos este problema ao expandir a exponencial em série de Taylor e aproximamos o resultado a apenas os dois primeiros termos, como feito na seção 2.5.2 para a fluência secundária. Assim, a fonte s_m será composta por duas parcelas:

$$s_m(\vec{r}) \cong s_m^0(\vec{r}) + s_m^1(\vec{r}) \quad (2.80)$$

onde s_m^0 será dado por

$$s_m^0(\vec{r}) = \tilde{\rho}(\vec{r}) \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \cdot \tilde{k}_s^0(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.81)$$

$$\tilde{k}_s^0(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \mu'_s(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.82)$$

e s_m^1 por

$$s_m^1(\vec{r}) = \tilde{\rho}(\vec{r}) \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \times [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] i\tilde{k}_s^1(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.83)$$

$$\tilde{k}_s^1(\vec{r} - \vec{r}') = \rho_e \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{r} - \vec{r}') \frac{e^{-\mu'|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \times \mu'(\vec{r} - \vec{r}') \mu'_s(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.84)$$

Devido às correções de densidade, a fonte para o múltiplo espalhamento não pode mais ser escrita em função da fluência secundária, como ocorreu no caso homogêneo.

O kerma associado ao múltiplo espalhamento é dado pela equação 2.44 e a respectiva dose será aproximadamente igual ao kerma pelo mesmo motivo apresentado na seção 2.4.3.

A função da fonte s_m é aproximada pela soma dos dois primeiros termos de uma expansão em série, conforme equação 2.80. Portanto, a dose de múltiplo espalhamento será escrita

como uma soma de dois termos:

$$D_m(\vec{r}) = D_m^0(\vec{r}) + D_m^1(\vec{r}) \quad (2.85)$$

onde o termo de ordem zero é dado por

$$D_m^0(\vec{r}) = \int \int \int_V s_m^0(\vec{r}') k_m^0(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.86)$$

e o de primeira ordem por

$$D_m^1(\vec{r}) = \int \int \int_V s_m^1(\vec{r}') k_m^1(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.87)$$

O núcleo de convolução $k_m^0(\vec{r} - \vec{r}')$ é o mesmo dado pela multiplicação sugerida na expressão 2.44. Os coeficientes μ' , μ'_{en} e μ'_s são calculados na mesma energia E_s que para os meios homogêneos.

Os dois termos que compõem a dose D_m não podem ser escritos na forma:

$$\int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') k(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.88)$$

A dependência da fonte s_m , equação 2.78, com o primeiro $\tilde{\rho}$ impede tal fato. Em consequência, não poderemos escrever a dose total como uma única convolução (veja a seção 2.5.4). Este resultado é o obtido por Boyer em [4].

Para uso nesta tese desejamos que a dose total seja uma convolução da fluência primária e da densidade relativa com um núcleo de deposição de energia, e assim sugerimos a seguinte aproximação para a função da fonte s_m :

$$s_m^0(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \cdot \tilde{k}_s^0(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.89)$$

$$s_m^1(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') \times [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] \tilde{k}_s^1(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.90)$$

onde desconsideramos a correção da densidade relativa agindo sobre a fonte s_m .

Assim a dose de múltiplo espalhamento pode ser escrita da mesma forma que as outras componentes da dose:

$$D_m^0(\vec{r}) = \int \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') k_{s,m}^0(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.91)$$

$$D_m^1(\vec{r}) = \int \int_V \Phi_p(\vec{r}') \tilde{\rho}(\vec{r}') [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] k_{s,m}^1(\vec{r} - \vec{r}') dV' \quad (2.92)$$

sendo $k_{s,m}^0$ e $k_{s,m}^1$ calculados da mesma maneira sugerida pela equação 2.49.

Esta é uma aproximação válida porque sabemos que a dose de múltiplo espalhamento é uma fração pequena da dose total, e que correções deste tipo podem ser desprezadas [3]. Notamos também que a dose de múltiplo espalhamento para meios heterogêneos se reduz à respectiva expressão para meios homogêneos quando a densidade relativa for unitária.

2.5.4 A dose total

A dose total será formada pela soma das doses parciais D_p , D_s e D_m . Devido às correções da dose em primeira ordem não poderemos calcular a dose total realizando apenas uma integral de convolução como foi feito na equação 2.53. Neste caso vamos necessitar do cálculo de duas integrais de convolução para conseguirmos a dose total $D(\vec{r})$:

$$D(\vec{r}) = D^0(\vec{r}) + D^1(\vec{r}) \quad (2.93)$$

sendo D^0 uma convolução onde temos como núcleo a soma da dose primária com a aproximação em primeira ordem da dose secundária e de múltiplo espalhamento:

$$D^0(\vec{r}) = \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \tilde{\rho}(\vec{r}') \cdot k^0(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.94)$$

$$k^0(\vec{r} - \vec{r}') = k_p(\vec{r} - \vec{r}') + k_s^0(\vec{r} - \vec{r}') + k_{s,m}^0(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.95)$$

D^1 será composta pela soma da aproximação de primeira ordem da dose secundária com a respectiva aproximação da dose de múltiplo espalhamento:

$$D^1(\vec{r}) = \int_V \Phi_p(\vec{r}') \cdot \tilde{\rho}(\vec{r}') [1 - \tilde{\rho}(\vec{r}')] \cdot k^1(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (2.96)$$

$$k^1(\vec{r} - \vec{r}') = k_s^1(\vec{r} - \vec{r}') + k_{s,m}^1(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.97)$$

Concluimos, portanto, chegando a um modelo teórico para o cálculo da dose de radiação em que fazemos as correções de densidade de estruturas heterogêneas. Este modelo apresenta uma boa concordância com dados experimentais [4] em que as estruturas heterogêneas têm aproximadamente o mesmo número atômico efetivo que o da água, diferindo apenas em sua densidade. Porém não é esperado que ele apresente um bom resultado quando aplicado a meios onde as estruturas heterogêneas tenham um número atômico efetivo muito diferente

do da água, pois este fato implicaria em um modelo onde k_0 e k_1 dependessem da posição onde a integral D^0 ou D^1 fossem calculadas, impedindo que as expressões para a dose fossem escritas na forma de convolução.

Capítulo 3

Simulação por Monte Carlo

Como mostramos no capítulo anterior, a dose absorvida pelo meio em um determinado ponto depende de elétrons e fótons lançados em outro local. O equacionamento do transporte de fótons após algumas colisões se torna complexo e o de elétrons quase impossível devido à grande variedade de processos e a enorme quantidade de colisões aleatórias. Por este motivo não conseguimos determinar a dose através de métodos analíticos sem fazer certas aproximações. Uma outra forma de obtermos estas informações, e também a mais precisa, é por meio de simulação de Monte Carlo.

Técnicas de simulações são amplamente usadas em pesquisas físicas onde desejamos ter acesso a certas grandezas que não podem ser medidas e nem analiticamente equacionadas. A simulação das interações eletromagnéticas consiste no uso das distribuições de probabilidades de colisão individual de elétrons, pósitrons e fótons com a matéria para encontrar o trajeto a ser percorrido por cada partícula e as energias das partículas produzidas. Nestes processos armazenamos as quantidades físicas de interesse em nossos estudos.

Discutiremos neste capítulo o programa adotado de simulação EGS4 (Electron Gamma Shower)[12] e o método que o mesmo usa para simular as interações eletromagnéticas. Apresentaremos também o tratamento aplicado às simulações dos núcleos de deposição de energia estudados teoricamente.

3.1 O programa de simulação EGS4

O sistema EGS é um pacote de rotinas de simulação de interações eletromagnéticas desenvolvido pelos pesquisadores do SLAC (Stanford Linear Accelerator Center) em 1978 com o objetivo de estudar as interações eletromagnéticas em aceleradores. As primeiras distribuições tinham como limite inferior de energia para o transporte de fótons a energia de 100 keV

e 1 MeV para elétrons. Porém a popularidade deste programa cresceu principalmente quando estes limites inferiores caíram para 1 keV (fótons) e 10 keV (elétrons), mostrando que o programa foi muito bem recebido pelos pesquisadores que trabalhavam a baixas energias. A versão EGS4 foi lançada em 1985, consolidando estes desenvolvimentos.

Outro fato que nos auxiliou na adoção do EGS4 foi a facilidade na obtenção do programa via rede mundial de computadores.

As rotinas são escritas em Mortran3, uma linguagem de programação que permite ao usuário tanto chamar as rotinas do EGS4, como processar os dados que estão sendo simulados.

3.2 O processo de simulação

Quando transportamos um fóton através de um meio material infinito, em algum ponto ocorrerá uma interação (colisão) deste fóton com o meio. O ponto onde ocorre esta interação é de natureza aleatória, porém a função que determina esta probabilidade é bem conhecida. Então podemos simular no computador o que acontece na prática, sorteando a partir da distribuição de probabilidades o ponto onde o fóton colide.

O estado do sistema após esta primeira interação também pode ser sorteado, bastando saber as distribuição de probabilidades dos possíveis processos e da direção final das partículas envolvidas. Este método pode ser aplicado sucessivamente até que todas as partículas filhas sejam freadas pelo meio material.

Vamos denotar uma variável aleatória por \hat{x} e a probabilidade desta variável estar contida no intervalo (a, b) por $Pr \{a < \hat{x} < b\}$. Podemos definir uma função de distribuição (ou função de distribuição cumulativa) como

$$F(x) = Pr \{\hat{x} < x\} \quad (3.1)$$

Se $F(x)$ for diferenciável, então a primeira derivada desta função de distribuição, $f(x) = dF(x)/dx$, é chamada de função densidade de probabilidade, e vale a relação:

$$Pr \{a < \hat{x} < b\} = \int_a^b f(x) \cdot dx \quad (3.2)$$

Na prática quase todos os métodos de sorteio baseiam-se na possibilidade de gerar em computadores seqüências de números aleatórios distribuídos segundo uma $f(x)$, a partir de uma seqüência de números aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e 1. Se $\hat{\zeta}$ for uma variável randômica uniformemente distribuída e seu valor sorteado for ζ , então pode-se

sortear um valor da variável \hat{x} , a partir do valor de ζ , pelo chamado método da inversão:

$$F(x) = \zeta \quad (3.3)$$

e resolvendo para x :

$$x = F^{-1}(\zeta) \quad (3.4)$$

Para tal é importante atentar para que a $F(x)$ esteja normalizada no intervalo da variável \hat{x} , (a, b) .

Existe um outro procedimento que é muito usado em casos onde a função a ser simulada é bastante complexa, que chamamos de composição e rejeição. Como o próprio nome sugere, este método é uma combinação das técnicas de composição e rejeição, baseado nos conceitos elementares de probabilidade. Assim, se uma função de densidade de probabilidade $h(x)$ puder ser decomposta da seguinte forma:

$$h(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f_i(x) g_i(x) \quad (3.5)$$

sendo α_i um número real positivo que corresponde ao peso atribuído à parcela $f_i(x)$. A função $h(x)$, assim como cada $f_i(x)$ devem estar normalizadas no intervalo de definição da variável x . O somatório $\sum_{i=1}^n \alpha_i f_i(x)$ é conhecido como função de composição, dada pela definição elementar de probabilidade, onde diferentes processos podem acontecer com diferentes pesos (α_i). $g_i(x)$ é uma função de rejeição e deve estar contida em $[0, 1]$.

Desta maneira o processo de simulação da expressão 3.5 fica:

1. Escolhemos a parcela i dos n elementos do somatório de acordo com a expressão

$$\frac{\sum_{j=1}^{i-1} \alpha_j}{\sum_{j=1}^n \alpha_j} < \zeta_1 \leq \frac{\sum_{j=1}^i \alpha_j}{\sum_{j=1}^n \alpha_j} \quad (3.6)$$

onde ζ_1 é um número aleatório entre $[0, 1]$. Digamos que seja encontrado $i = 4$.

2. Sorteamos outro número aleatório ζ_2 e encontramos x de $f_4(x)$ resolvendo a integral $\int_a^x f_4(x') dx' = \zeta_2$, como mostramos na figura 3.1. Em outras palavras usa-se o método da inversão para a função $f_4(x)$.
3. Com ζ_3 terminamos por aceitar ou não o valor sorteado de x se $\zeta_3 \leq g_4(x)$ ou rejeitando-o, caso $\zeta_3 > g_4(x)$; a figura 3.2 nos mostra este processo graficamente.

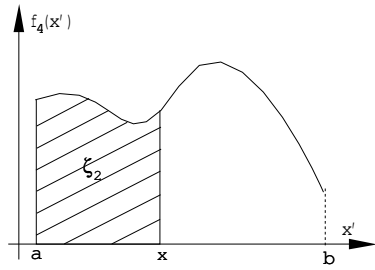


Figura 3.1: A função de composição

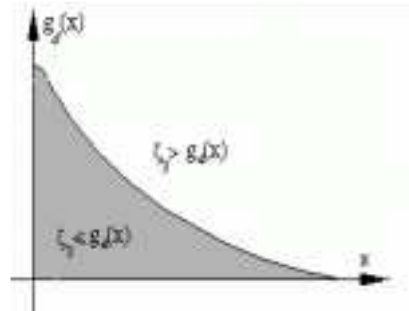


Figura 3.2: A função de composição.

4. Repete-se este processo retornando ao passo 1 até ser atingido o número de histórias desejadas.

As variáveis até então chamadas de aleatórias são na realidade pseudo-aleatórias, pois são geradas por algoritmos específicos. Tais algoritmos necessitam de, pelo menos, um número para iniciar a seqüência de número aleatórios. Este número é conhecido como semente para o número pseudo-aleatório. Então, ao repetirmos a semente em um programa de simulação no mesmo equipamento, a seqüência de números pseudo-aleatórios gerados será rigorosamente a mesma. Este fato será explorado na seção 3.3.

3.2.1 A simulação dos processos físicos

O livre caminho médio λ de uma partícula é dado por

$$\lambda = \frac{1}{\mu_t} = \frac{M}{\rho \cdot N_a \cdot \sigma_t} \quad (3.7)$$

sendo ρ a densidade do material, N_a o número de Avogadro, M o peso molecular e σ_t a seção de choque total por molécula. μ_t é a seção de choque total macroscópica. Sendo a função de densidade de probabilidade $e^{-r'/\lambda} dr'/\lambda$, o ponto onde irá ocorrer a primeira interação será dado por:

$$\int_0^\epsilon d\epsilon' = \int_0^r e^{-r'/\lambda} \frac{dr'}{\lambda} \quad (3.8)$$

$$1 - \epsilon = e^{-r/\lambda} \quad (3.9)$$

onde ϵ é um valor da variável aleatória distribuída uniformemente em $[0, 1]$, r é a distância até o ponto de interação. Se $\hat{\epsilon}$ é uma variável aleatória distribuída uniformemente entre o intervalo $[0,1]$, $1 - \hat{\epsilon} = \hat{\zeta}$ também o é. Assim podemos relacionar o ponto de interação r diretamente com o número aleatório por

$$r = -\lambda \ln \zeta \quad (3.10)$$

Tipicamente o livre caminho médio depende da posição, de mudanças de material ou, no caso de partículas carregadas, da energia, devido a perdas de energia para a ionização do meio [12]. Para sortear r através da equação 3.10 considera-se λ constante.

Após sabermos onde a partícula irá interagir, devemos sortear um dos processos físicos possíveis, cuja probabilidade é proporcional às seções de choque individuais.

O EGS4 faz a simulação do transporte e deposição de energia de fótons, elétrons, pósitrons, partícula por partícula. Os seguintes processos de interação dos fótons com a matéria são considerados no EGS4:

- efeito fotoelétrico;
- efeito Compton;
- produção de pares;
- espalhamento Rayleigh.

Para as partículas carregadas os processos são:

- espalhamento Möller;
- espalhamento Bhabha;
- aniquilação de par elétron-pósitron;
- bremsstrahlung;
- múltiplo espalhamento coulombiano;
- perda contínua de energia.

Este último item é o responsável pela deposição da dose de radiação ao longo da trajetória da partícula carregada.

As equações para as seções de choque e a forma como foram computacionalmente implementadas estão no manual do EGS4 [12].

O procedimento de transporte das partículas carregadas em um meio material é mais complicado que o de fótons porque as partículas como elétrons e pósitrons possuem um livre caminho médio tipicamente muito menor que o do fóton, tornando o processo de simulação de elétrons e pósitrons extremamente complicado. Quando um elétron, por exemplo, recebe uma quantidade de energia cinética ele, ao se deslocar pelo meio, sofre uma enorme quantidade de colisões elásticas, além de outros processos. Para resolver este problema os programas de simulação recorrem aos modelos que tratam o múltiplo espalhamento coulombiano. O tratamento que o EGS4 usa para este processo é o estudo de Molière que posteriormente foi simplificado por Bethe.

Este tratamento tende a ser um dos pontos mais críticos deste tipo de simulador, porque uma colisão onde haja uma troca de energia acima de certo valor mínimo pré-estabelecido

deve ser tratada como um evento onde as partículas secundárias geradas por esta colisão sejam transportadas individualmente, caso contrário a colisão não será discreta. Geralmente os simuladores de interações eletromagnéticas são divididos em duas classes: os de classe I, que usam o modelo CSDA (*Continuous Slowing Down Approximation*) onde partículas secundárias não são criadas [13], simplificando este processo; e os de classe II, que fazem todo o tratamento de criação e transporte de partículas secundárias.

No EGS4 existem variáveis específicas destinadas à distinção entre os processos de espalhamento múltiplo e discreto durante o transporte. A variável AE define a energia mínima em que uma colisão de uma partícula carregada com a matéria será tratada como discreta, e a AP define a energia mínima para que um fóton seja produzido por bremsstrahlung.

3.3 Simulando os núcleos de deposição de energia

Os núcleos de convolução são interpretados como a função que deposita a energia transportada pelo feixe de partículas, sejam elas fótons, elétrons, etc.

As formas existentes para obtermos este núcleo são:

- deconvolução da dose medida em água;
- cálculo analítico;
- simulação de Monte Carlo.

O primeiro envolve a medida da deposição de dose de feixes estreitos em um tanque de água, e sua posterior deconvolução[14]. Esse método gera apenas um núcleo de convolução relacionado à deposição total da dose e está limitado à precisão em que foram feitas as medidas.

O cálculo analítico nos permite entender por meio de quais processos a dose é distribuída, isto é, permite-nos compreender a física do problema. Porém não apresenta bons resultados para as deposições de energia devido aos múltiplos espalhamentos de fótons. Estes espalhamentos são difíceis de serem modelados analiticamente, sendo usual a sua aproximação pela teoria da difusão [3, 4].

Em contrapartida, a simulação de Monte Carlo nos permite obter bons resultados em uma ampla faixa de energias porque não exige que todas as interações sejam por efeito Compton e também porque transporta igualmente bem ordens baixas e altas de espalhamentos de fótons.

Sendo assim usamos os conceitos estudados no capítulo 2 para simular os núcleos de deposição de energia, com a diferença de que nesta dissertação não restringimos os processos somente ao efeito Compton, como o modelo teórico aproxima.

3.3.1 O Método usado nas simulações

A simulação dos núcleos consiste em fazer incidir um feixe estreito de fótons (área zero) sobre um meio material e forçá-lo a ter sua primeira interação em um ponto conhecido dentro do meio material. Após esta interação, começamos a transportar normalmente as partículas e a contabilizar separadamente as energias relacionadas a cada ordem de espalhamento. Assim como na teoria, teremos um grupo de deposição para a energia primária, um para a secundária e outro para os espalhamentos de terceira ordem e superiores. Para tanto adaptamos um programa chamado XYZP¹ que aplica as rotinas do EGS4 na simulação das interações de um feixe de partículas com a matéria e obtém a energia absorvida por este meio. As partículas incidentes são forçadas a terem a sua primeira interação em um ponto fixo porque estamos buscando a função de espalhamento de ponto (PSF).

A simulação é feita em três dimensões onde o meio é subdividido em células cúbicas e indexadas em um sistema cartesiano de eixos coordenados. Originalmente o programa XYZP faz a simulação de feixes paralelos de partículas incidentes em um meio material e contabiliza a dose absorvida por este meio.

3.3.1.1 A geometria e as técnicas utilizadas

O meio usado foi um cubo de água subdividido em células cúbicas, cercado por vácuo, conforme mostrado figura 3.3. Nessas células são contabilizadas as energias transferidas dos elétrons e pósitrons para o meio material. Este tanque de água recebe um feixe de fótons que incide perpendicularmente na direção convencionalmente como o eixo z, na figura 3.4.

Todo este trabalho é baseado na referência [15]. Neste artigo o autor ataca o problema em coordenadas esféricas através de um programa criado por eles mesmos, o SCASPH. Embora este sistema de coordenadas seja a melhor alternativa para a geração de núcleos de convolução, as coordenadas esféricas não são tão práticas, porque elas precisam ser convertidas em cartesianas respeitando-se a periodicidade amostral usada na fluência, a qual deve ser constante². Temos também o interesse, neste trabalho, de instalar, testar e interagir com as rotinas do EGS4 através da modificação de programas já existentes, introduzindo o uso do mesmo no nosso grupo de Física Médica pertencente ao Centro de Engenharia

¹Este programa pertence ao pacote do EGS4.

²Condição necessária para os algoritmos de transformada de Fourier rápida, discutida no capítulo seguinte.

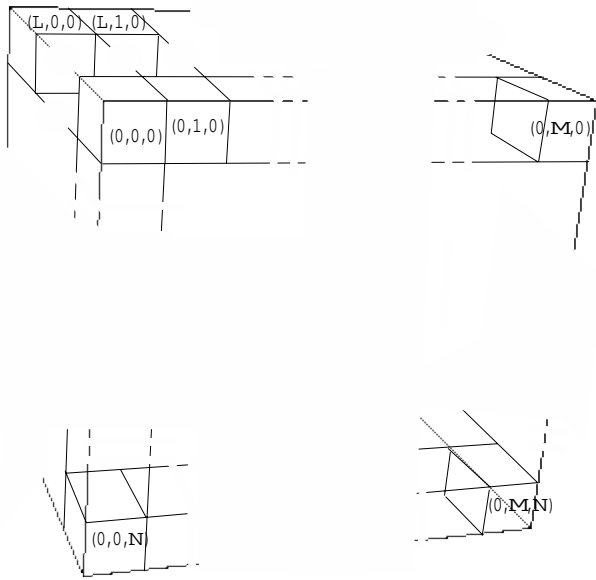


Figura 3.3: A subdivisão do meio usado nas simulações.

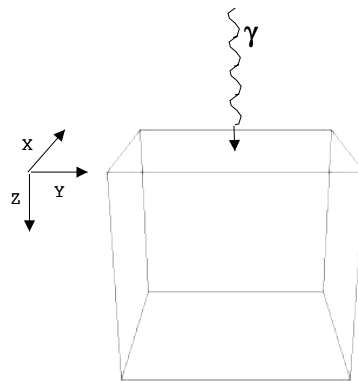


Figura 3.4: Geometria simulada e os eixos coordenados

Biomédica da Unicamp (CEB - Unicamp). Estes são os principais motivos para adotarmos as coordenadas cartesianas.

Usamos a unidade gray para contabilizar a dose absorvida em cada célula. Esta dose é dividida pelo número de fótons incidentes, assim teremos um resultado que é independente do número de histórias.

3.3.1.2 Os parâmetros da simulação

Escolhemos a energia de 1,25 MeV para o feixe primário de fótons pois representa a média das duas linhas de emissão de γ do ^{60}Co ³. O meio absorvedor usado é a água, de densidade $1\text{g}/\text{cm}^3$.

Os dados sobre a seção de choque foram gerados pelo PEGS conforme apresentado no apêndice E.

Os principais parâmetros usados no EGS4, bem como na execução do PEGS, estão na tabela 3.1. Destes, apenas o AE e AP são ajustados durante a execução do PEGS. Os valores

Nome do parâmetro	Descrição	Valores usados
EI	Energia do fóton incidente	1,25 MeV
NCASE	Número de histórias	10^7
ESTEPE	Máxima fração da energia perdida em cada passo pelo processo de perda contínua de energia	0,02
ECUT	Energia cinética mínima das partículas carregadas (<i>cut-off</i>)	50 keV
AE	Energia mínima para a produção de elétrons secundários	50 keV
PCUT	Energia mínima dos fótons (<i>cutoff</i>)	50 keV
AP	Energia mínima para a produção de fótons secundários	50 keV

Tabela 3.1: Parâmetros usados nas simulações

de ECUT, PCUT, AP e AE usados são baseados em [15].

ESTEPE é a máxima fração da energia cinética do elétron (pósitron) transferida para o meio pelo processo de perda contínua de energia. Esta variável limita diretamente o espaço percorrido pelo elétron a cada transporte. O valor para esta variável, mostrado na tabela 3.1, é o sugerido por [15] e fundamentado pelos estudos de [13, 17].

Valores menores que os apresentados na tabela 3.1 não alteram substancialmente o resultado mas aumentam o tempo de simulação.

³As linhas são: 1,127MeV e 1,33 MeV[16]

3.3.1.3 A contabilização da energia depositada

O feixe de fótons que incide perpendicularmente à superfície xy do cubo de água possui área zero⁴, isto é, ele é ideal. “Forçamos” todos os fótons a terem sua primeira interação a uma profundidade conhecida, exatamente no centro de uma célula. A profundidade pode ser escolhida de tal maneira que todo o máximo de energia seja depositada dentro do meio.

A maneira como alteramos o programa XYZP para que ele simulasse os núcleos de convolução é descrita no apêndice D.

Por convenção, a face xy por onde entra a partícula tem como coordenada espacial de profundidade $z = 0$, e este valor aumenta com o aumento da profundidade, da mesma forma os índices das células também aumentam na mesma direção dos eixos. Todo este tanque de água é cercado por vácuo, por isso cada partícula que ultrapassar as fronteiras deste tanque terá sua história terminada.

Na figura 3.5 temos esquematizado o processo completo de simulação dos núcleos de convolução que será descrito em mais detalhes a seguir. Para cada espécie de núcleo simulado fizemos um programa específico. Deste modo, cada núcleo foi simulado separadamente.

3.3.1.4 Núcleo primário

Para o núcleo primário desejamos saber como é a deposição da dose devido aos elétrons e pósitrons gerados na primeira interação, conforme mostrado na figura 3.5. Assim na simulação do núcleo primário o fóton incidente interage no ponto desejado e são transportadas as partículas carregadas criadas e sua energia é transferida para o meio. O primeiro processo é aleatório e pode ser qualquer uma dos apresentados anteriormente⁵. Qualquer fóton que venha a ser gerado nesta primeira interação ou nas posteriores não será transportado.

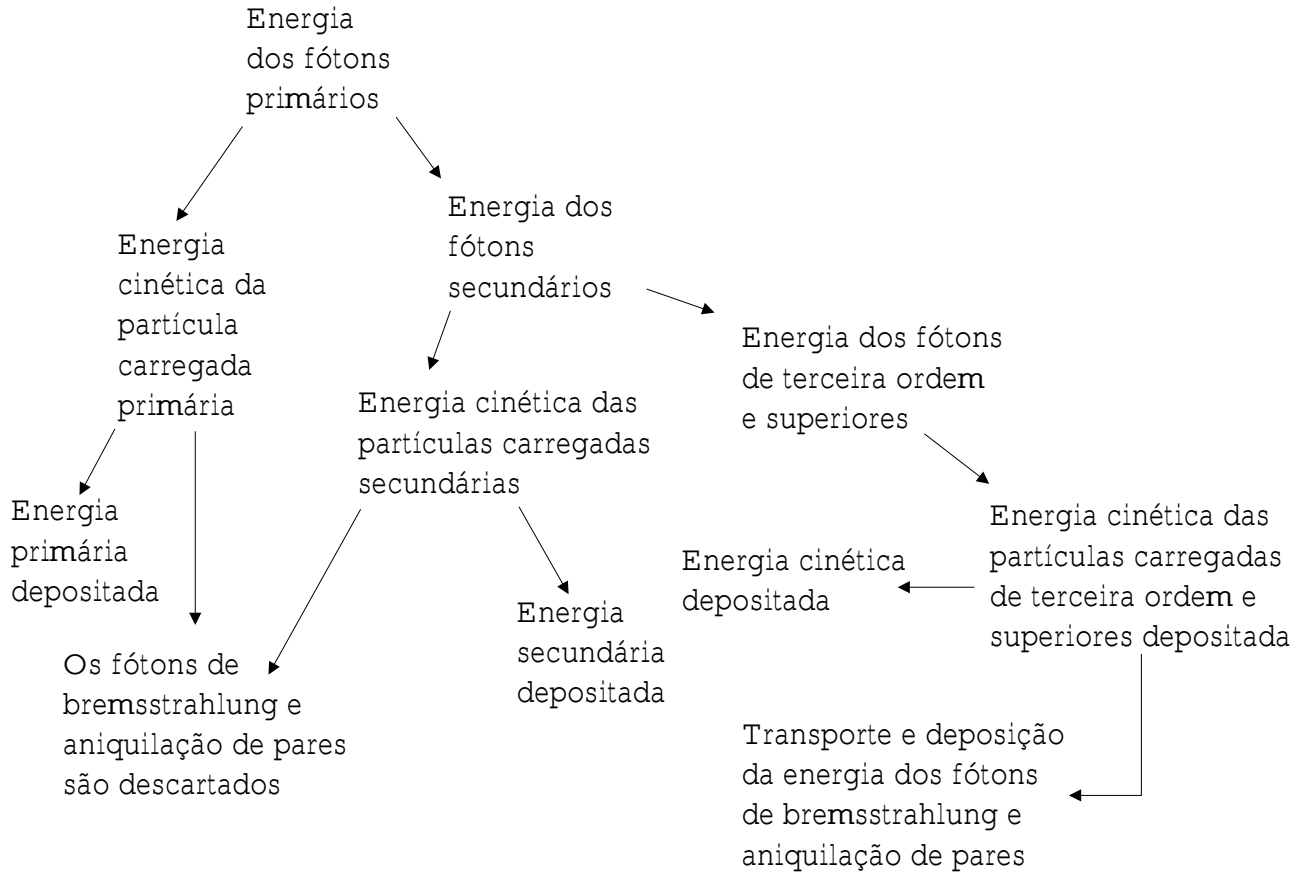
3.3.1.5 Núcleo secundário

O núcleo secundário de deposição de energia contabiliza somente as partículas carregadas lançadas pelo fóton secundário. Este fóton existe somente se a primeira interação for por efeito Compton, caso contrário a história é imediatamente terminada. Então, saindo da primeira interação, o fóton secundário será simulado sem nenhuma outra intervenção. Na segunda interação as partículas carregadas serão transportadas sem restrições. O processo pelo qual ocorre a segunda interação do fóton também é livre. Quaisquer fótons gerados após a segunda colisão serão descartados.

⁴Também conhecido como *pencil beam*.

⁵Exceto Rayleigh porque o XYZP não usa este processo. Tal processo também não transfere energia e, como um todo, não é muito provável de acontecer. A não ativação desta opção reduz o tempo de simulação.

Figura 3.5: O organograma do processo de simulação dos núcleos de convolução



3.3.1.6 Núcleo de múltiplo espalhamento

Neste núcleo os primeiros processos de interação dos fótons ocorrem da mesma forma como no secundário, porém a energia das partículas secundárias não são contabilizadas. Mas agora não vamos descartar nenhuma outra partícula após a terceira interação do fóton e todas as partículas carregadas serão transportadas e contabilizadas normalmente. O processo pelo qual ocorrem a terceira interação e as posteriores também não sofre nenhuma restrição.

Neste núcleo também transportaremos e contabilizaremos todos os fótons gerados por bremsstrahlung e aniquilação de pares (caso haja). Embora no artigo [15] os fótons gerados pelo processo de bremsstrahlung e aniquilação de pares sejam sempre contabilizados separadamente, eles possuem uma afinidade maior com o grupo de múltiplo espalhamento de fótons. Mas é importante lembrar que somente os fótons gerados pelas partículas carregadas de terceira ordem ou ordens superiores serão contabilizados no grupo de múltiplo espalhamento de fótons.

Capítulo 4

O Método Numérico

Neste capítulo discutiremos os métodos numéricos usados para calcular as integrais de convolução do capítulo 2 usando os núcleos de deposição de energia simulados no capítulo 3.

Primeiro veremos como modificar as expressões integrais teóricas da dose para que possamos usar os núcleos de deposição de energia simulados. A seguir mostraremos como a fluência deve ser discretizada.

Por fim, discutiremos a técnica de transformada de Fourier rápida (em inglês *Fast Fourier Transform* - FFT) para fazer as convoluções numericamente.

Implementamos somente o modelo para as doses parciais de ordem zero porque é possível simular o núcleo desta ordem. Os núcleos de primeira ordem não são facilmente simulados no EGS4 e este foi o motivo pelo qual não o implementamos.

4.1 O cálculo computacional da dose

Os artigos mais antigos apresentam cálculos de dose em duas dimensões (2D) [3, 4], tendo integrado previamente os dados em uma das direções perpendiculares ao campo. Optamos por trabalhar em 3D porque atualmente dispomos de equipamentos capazes de indexar matrizes grandes e ao mesmo tempo manter uma boa precisão nos resultados.

Usaremos uma matriz de dimensões $L \times M \times N$ representando as células no meio em coordenadas cartesianas, onde cada célula é indexada respectivamente pelos índices i, j, k e contém o valor da densidade relativa naquele ponto. O formato dos arquivos de dados desta matriz 3D está descrito no apêndice F. Por questões de economia de memória somente descreveremos o meio absorvedor nesta matriz, excluindo o ar entre a fonte e o meio

absorvedor¹.

Para efetuarmos os cálculos numéricos devemos primeiro discretizar as funções envolvidas nas expressões das convoluções para as doses parciais, nas equações 2.54, 2.73 e 2.85.

A simulação nos fornece os núcleos de deposição de energia discretizados em células de $0,5 \times 0,5 \times 0,5 \text{ cm}^3$, por isso a fluência também será discretizada em células de mesmo tamanho. Este é o menor elemento de volume a que teremos associado um valor de dose, por isso o tamanho destas células designa a resolução espacial.

Os núcleos de deposição de energia simulados têm dimensão de *gray/fóton* e os apresentados no capítulo teórico de *gray/cm*, portanto deveremos modificar as expressões das funções envolvidas nos cálculos teóricos para que possamos usar os núcleos de convolução simulados.

Como na simulação dos núcleos consideramos apenas um feixe infinitesimal (área zero) de fótons, esperamos que a outra função que substituirá a fluência na integral de convolução seja apenas o número de fótons na posição \vec{r} . Assim

$$D(\vec{r}) = \int \int \int_V N(\vec{r}') \cdot k(\vec{r} - \vec{r}') \cdot dV' \quad (4.1)$$

sendo $N(\vec{r}')$ o número de fótons e $k(\vec{r} - \vec{r}')$ o núcleo de deposição de energia dado em *gray/(fótons \times cm^3)*. Portanto os núcleos de deposição de energia simulados devem ser divididos pelo volume das células [10]. Assim, quando integrado em todo o espaço V , teremos a dose “total” em \vec{r} daquele tipo de processo descrito pelo núcleo de deposição de energia $k(\vec{r} - \vec{r}')$ e pelo número de fótons $N(\vec{r}')$.

Embora N seja o número de fótons, continuaremos a tratá-lo como fluência primária por motivos que serão esclarecidos logo mais.

4.2 A matriz da fluência primária

Os modelos teóricos estudados no capítulo 2 se baseiam em uma expressão para a fluência onde não consta a divergência geométrica. Esta divergência existe e suas características são inerentes ao equipamento. A máquina do CEB de teleterapia é composta por uma fonte em forma de um disco de 2 cm de diâmetro, e por um conjunto de colimadores. A distância da fonte aos colimadores z_c é de 45 cm [18]. Com esta geometria, um campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ em uma superfície plana distante 80 cm da fonte se tornaria de $13,75 \times 13,75 \text{ cm}^2$ a uma profundidade de 30 cm da superfície. Note que estamos tratando a divergência como

¹Desprezamos o espalhamento dos fótons pelo ar.

geométrica apenas, porque a queda com o inverso do quadrado da distância foi preservada durante os estudos teóricos.

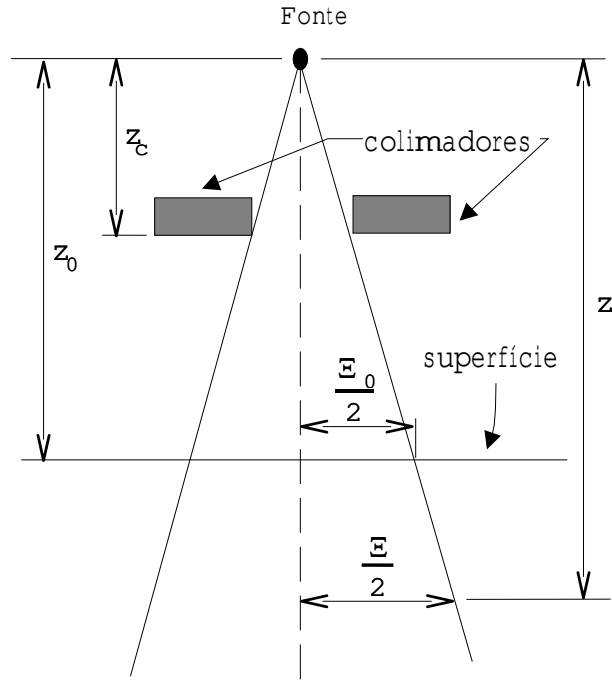


Figura 4.1: A divergência geométrica da fonte

Na figura 4.1 esquematizamos um equipamento de teleterapia onde a distância SSD é dada por z_0 , o campo na superfície por Ξ_0 , e Ξ é o campo na profundidade z . Matematicamente o campo em z é descrito por

$$\Xi(z) = z \cdot \left(\frac{\Xi_0}{z_0} \right) \quad (4.2)$$

Se descrevêssemos esta divergência na função da fluência primária, não conseguiríamos construir os modelos teóricos do capítulo 2 com a mesma facilidade.

Porém, os mesmos argumentos que usamos anteriormente para desprezar a divergência agora legitimam a sua implementação computacional.

4.2.1 A implementação computacional

Como já discutimos anteriormente, devemos alterar as dimensões da fluência usada na convolução para que tenhamos como resultado a dose em gray. Partimos então da equação 2.1, e sendo a área do campo uma constante, chegaremos a uma equação para o número de

fótons N_p em função do vetor posição \vec{r} , dado por

$$N_p(\vec{r}) = N_0(\vec{r}_0) \cdot \left| \frac{\vec{r}_0}{\vec{r}} \right|^2 \cdot \exp \left[- \int_{r_0}^r \mu(\vec{l}) \cdot d\vec{l} \right] \quad (4.3)$$

onde N_0 é o número de fótons na superfície do meio absorvedor e as outras variáveis são as mesmas da equação 2.1.

Assim, chegamos facilmente a uma expressão discretizada para o número de fótons,

$$N_p(i, j, k) = N_0(i, j, k) \cdot \left| \frac{Z_0}{k \cdot \Delta\ell + Z_0} \right|^2 \cdot \prod_{k=0}^Z \exp \left[- \frac{\mu}{\rho_{H_2O}} \cdot \rho(i, j, k) \cdot \Delta\ell \right] \quad (4.4)$$

sendo Z_0 a distância da fonte à superfície, $\Delta\ell$ é a lateral da célula cúbica em centímetros, i, j, k são os índices das células, $\frac{\mu}{\rho_{H_2O}}$ é o coeficiente de atenuação linear em massa da água dado em cm^2/g e $\rho(i, j, k)$ é a densidade da célula em g/cm^3 . Note que estamos somando Z_0 a $k \cdot \Delta\ell$ porque estamos calculando a fluência somente dentro do meio espalhador, e o índice $k = 0$ corresponde à primeira camada de células.

A função $N_0(i, j, k)$ descreve a extensão do campo em qualquer ponto do meio absorvedor. Assim, para um campo quadrado teremos:

$$N_0(i, j, k) = \begin{cases} 1 & \text{se } -\frac{\Xi_k}{2} < i' < \frac{\Xi_k}{2} \text{ e } -\frac{\Xi_k}{2} < j' < \frac{\Xi_k}{2} \\ 0 & \text{se } -\frac{\Xi_k}{2} > i' > \frac{\Xi_k}{2} \text{ e } -\frac{\Xi_k}{2} > j' > \frac{\Xi_k}{2} \end{cases} \quad (4.5)$$

onde i' e j' são os respectivos centros da matriz do meio absorvedor dados por: $i' = i - \frac{L}{2}$ e $j' = j - \frac{M}{2}$. Nesta tese usaremos dois tipos de campo quadrado: um com e outro sem divergência geométrica. Então $\Xi_k = 1$ para campo sem divergência em qualquer k , e $\Xi_k = (k \cdot \Delta\ell + z_0) \cdot \frac{\Xi_0}{z_0}$ para campo com divergência com $k = 0, 1, 2 \dots N$.

Normalmente N_0 tem seu valor atribuído ao número de fótons em um determinado ponto, mas, como veremos no capítulo 5, estamos interessados apenas nos valores relativos das curvas de isodose quando o pico é normalizado a 100%. Por este motivo, todas as constantes que multiplicam tanto a fluência quanto o núcleo de deposição de energia serão englobadas em uma única constante de normalização.

4.3 Convolução via FFT

O problema a ser discutido agora é como fazer da maneira mais eficiente possível as integrais de convolução apresentadas no capítulo 2. Estas integrais serão feitas numericamente,

portanto devemos primeiro discretizá-las.

Discretizamos uma integral simples da seguinte forma:

$$\int f(\tau) d\tau \longrightarrow \sum_n f(nT) \quad (4.6)$$

onde n é o índice da soma e T é o intervalo entre os pontos.

Então podemos escrever uma integral de convolução na sua forma discreta assim

$$h(t) = \int_0^\ell f(\tau) \cdot g(t - \tau) d\tau \longrightarrow \hat{h}(t_k) = \sum_{n=0}^N f(nT) \cdot g(t_k - nT) \quad (4.7)$$

onde o intervalo ℓ foi subdividido em N partes de comprimento T , e $k = 0, 1, 2 \dots N$. $\hat{h}(t_k)$ representa a função $h(t)$ amostrada no ponto t_k .

Temos N pontos para serem amostrados e cada um deles é o resultado da soma sobre os N termos, portanto o tempo computacional para este cálculo de convolução é proporcional a N^2 . Mas esta é uma operação custosa em termos de tempo de processamento, especialmente quando temos grandes conjuntos de dados. Como mostraremos a seguir, a alternativa encontrada para reduzir o tempo de cálculo foi usar os algoritmos de transformada de Fourier rápida (FFT) [19, 20].

4.3.1 A Transformada de Fourier Rápida

Em 1965 Cooley e Tukey publicaram um algoritmo matemático que reduzia o número de operações nos procedimentos de transformadas de Fourier, tornando-se o primeiro algoritmo de FFT. A redução no tempo de computação é considerável, indo de N^2 para $N \log_2 N$ para cada transformada de Fourier [20].

As expressões para uma transformada de Fourier (eq. 4.8) e sua inversa (eq. 4.9) são:

$$H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{-i2\pi ft} dt \quad (4.8)$$

$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} H(f) e^{i2\pi ft} df \quad (4.9)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, e t e f são parâmetros das suas respectivas funções.

Assumimos também a equivalência entre as transformadas contínuas e as discretas [20]. Esta afirmação é válida quando observadas as restrições apresentadas na seção 4.3.1.1.

A transformada de Fourier de uma função $h(t)$ será denotada por $\mathfrak{F}\{h(t)\} = H(f)$ e a

transformada inversa por $\mathfrak{S}^{-1}\{H(f)\} = h(t)$.

Uma convolução de p com q pode ser indicada por $h = p \star q$. É uma propriedade da transformada de Fourier a seguinte relação [20, 21]:

$$\mathfrak{S}\{h\} = \mathfrak{S}\{p\} \times \mathfrak{S}\{q\} \quad (4.10)$$

Este fato é o que torna a aplicação do cálculo de convolução realmente interessante. É por este motivo que, no capítulo 2, sempre buscamos a integral de convolução.

4.3.1.1 Os Teoremas da Amostragem

Seja uma função unidimensional contínua e suave $p(t)$ definida em um intervalo $-\infty < t < \infty$. Esta função deve possuir variações tais que a máxima frequência relacionada seja f_c , isto é, a função tenha a sua banda de frequências limitada a, no máximo, f_c . Este é o primeiro teorema da amostragem.

O segundo teorema enuncia que o intervalo entre as amostragens T para realizar uma operação de FFT deve obedecer a seguinte expressão:

$$T < \frac{1}{2f_c} \quad (4.11)$$

Uma operação como a mostrada na equação 4.12 deverá ser corretamente transformada se a expressão acima for obedecida. Caso tenhamos $T > \frac{1}{2f_c}$, esta mesma operação apresentará ondulações resultantes do batimento entre a frequência de amostragem e as frequências mais altas presentes na função $p(t)$. Este fenômeno é conhecido como *aliasing*.

$$\mathfrak{S}\{p\} = P \longrightarrow \mathfrak{S}^{-1}\{P\} = p \quad (4.12)$$

A condição $\frac{1}{T} = 2f_c$ indica a menor frequência de amostragem para obtermos $\mathfrak{S}\{p\}$ corretamente. Esta frequência é também conhecida como frequência de Nyquist.

A discussão apresentada até o momento é para funções unidimensionais periódicas, mas pode facilmente ser estendida para n dimensões.

O nosso problema envolve uma convolução entre duas funções distintas. A primeira é a fluência primária que é uma expressão monotônica decrescente e suave, portanto não teremos problemas com o teoremas da amostragem. A função de densidade relativa $\tilde{\rho}$ também faz parte de primeira função da convolução e devemos obedecer o teorema da amostragem na montagem desta matriz, o que será feita manualmente.

Consequimos o núcleo de deposição de energia, que é a segunda função, através de uma

simulação onde os dados são gerados discretizados. Se quisermos reduzir a resolução deste núcleo devemos estudar o seu espectro de frequências e, se necessário, filtrá-lo para satisfazer a condição 4.11, mas este tratamento está além do objetivo desta tese e, portanto, não será feito.

4.3.2 Convolução de duas funções finitas

Com a propriedade apresentada na equação 4.10 podemos fazer uma convolução usando apenas três transformadas de Fourier e uma operação de multiplicação, independentemente da dimensão das funções, podendo ser de 1D, 2D, 3D, etc.

Em 3D com um conjunto amostral de $L \times M \times N$, onde L, M, N são os números de pontos da função em cada direção ortogonal, dados respectivamente pelos índices i, j, k , o cálculo convencional de uma transformada de Fourier exigiria um tempo proporcional a $(L \times M \times N)^2$ e via FFT teremos apenas $(L \times M \times N) \log_2(L \times M \times N)$ [20, 19].

Nenhuma das duas funções utilizadas nos cálculos por convolução deste trabalho apresenta periodicidade, propriedade exigida na convolução via FFT. Sem a periodicidade, pode haver sobreposição das funções após a convolução (conhecido como “efeito de borda”). É importante ressaltar que o número de pontos e o intervalo das duas funções usadas na convolução também podem ser diferentes.

Suponha que temos duas funções 1D, $f(x_i)$ com P pontos e $g(x_i)$ com Q pontos. Para evitar o efeito de sobreposição devemos estender ambas as funções para um tamanho $N > P + Q - 1$ e preencher estes espaços com zeros. Desta forma teremos:

$$f(x_i) = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_P & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}_{1 \times N} \quad (4.13)$$

$$g(x_i) = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_Q & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}_{1 \times N} \quad (4.14)$$

Agora temos as duas funções com o mesmo número de pontos e com zeros suficientes para evitar a sobreposição. A este procedimento damos o nome de *Zero Padding* [20, 22].

Para 3D devemos estender da mesma maneira cada uma das três direções com termos nulos.

4.3.2.1 O deslocamento dos dados

Quando fazemos uma convolução de dados não periódicos, o espaço de amostragem de saída tem o tamanho do espaço de entrada mais a extensão do *padding* de zeros. O número de células equivalente a este *padding* deve ser extraído do resultado final.

No nosso caso os dados corretos estão transladados pela matriz estendida após a convolução, e a translação corresponde exatamente à distância do valor máximo presente no conjunto de dados do núcleo de convolução à sua origem. Para corrigir este problema temos duas alternativas [20]:

- transladar previamente o pico do núcleo de convolução para a origem;
- transladar posteriormente os dados após os cálculos.

A primeira alternativa é a melhor, pois torna possível a otimização dos cálculos durante a convolução e também é a técnica mais elegante [20, 22]. No entanto, como estamos trabalhando em 3D, ela dificulta a visualização e a manipulação dos dados contidos no núcleo de convolução. Por isso nesta tese será usada a translação posterior por ser mais prática e simples. A forma mais elegante deverá ser implementada ao longo do trabalho de otimização do código, posterior à dissertação.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentamos e discutimos os resultados das simulações para a obtenção dos núcleos de deposição de energia e os resultados obtidos pelo algoritmo de cálculo da dose por convolução utilizando estes núcleos simulados.

5.1 Os núcleos de deposição de energia

As simulações foram feitas considerando tanques de água¹ de forma cúbica discretizados em células também cúbicas de $0,5 \times 0,5 \times 0,5 \text{ cm}^3$. As dimensões adotadas para os tanques são diferentes para cada núcleo.

Todos os núcleos de deposição de energia usados nesta tese foram simulados na máquina Thor² com 10^7 histórias, mas fizemos simulações nas máquinas Araguaia e HAL9000 e os resultados apresentaram variações da ordem de 10% nos valores de pico dos núcleos. As maiores diferenças estão nos núcleos secundário e de múltiplo espalhamento. Este fato sugere uma flutuação estatística e a solução proposta seria aumentar o número de histórias. Porém este aumento significaria um aumento considerável no tempo de simulação. O aumento de uma ordem de grandeza no número de histórias levaria a simulação a tomar algumas centenas de horas de CPU.

5.1.1 O núcleo de deposição de energia primária

Simulamos o núcleo de deposição primária de energia para um tanque de $5 \times 5 \times 5 \text{ cm}^3$. As figuras 5.1 e 5.2 mostram o resultado obtido para esta simulação.

¹Também conhecidos por fantom na literatura técnica.

²Veja as configurações dos computadores no apêndice G.

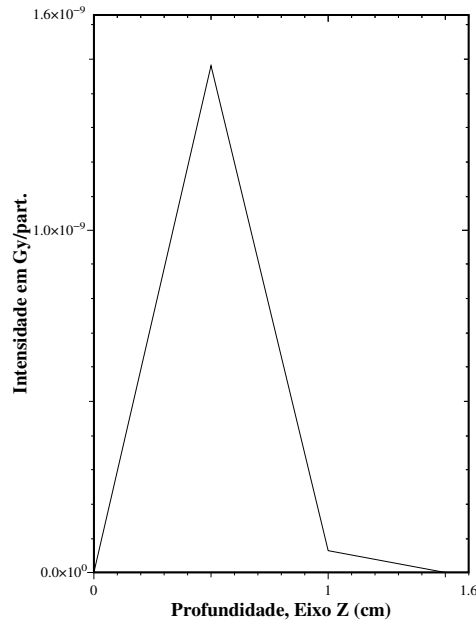


Figura 5.1: Perfil do núcleo primário de convolução.

Na figura 5.1 temos o perfil de dose depositada na profundidade z pelas partículas primárias. Neste gráfico observamos o pico de deposição de energia de todo meio, $1,477 \times 10^{-9}$ gray/partícula. Os dados até 10^{-13} gray/partícula têm no máximo 1% de incerteza. O tempo de CPU³ tomado por todas as histórias desta simulação foi de aproximadamente 0,7 horas.

Deste mesmo conjunto de dados extraímos um gráfico em isolinhas, que nos permite ter uma idéia da distribuição da dose em um corte no plano do pico da dose, como na figura 5.2.

As posições em centímetro anotadas nos eixos destes gráficos e dos posteriores não correspondem à posição absoluta no tanque de água. Não há a necessidade dessa coincidência e nem mesmo de saber a posição real em que ocorreu a primeira interação do fóton com o meio, pois para a convolução apenas importa a posição dos dados em relação ao pico, como discutido no capítulo 4.

5.1.1.1 Os limites de resolução

O modelo adotado pela subrotina de múltiplo espalhamento coulombiano do EGS4 é válido somente quando, durante o transporte, a partícula carregada sofre pelo menos 20 colisões

³Tempo de CPU significa o tempo que a máquina dedicou exclusivamente para este processo.

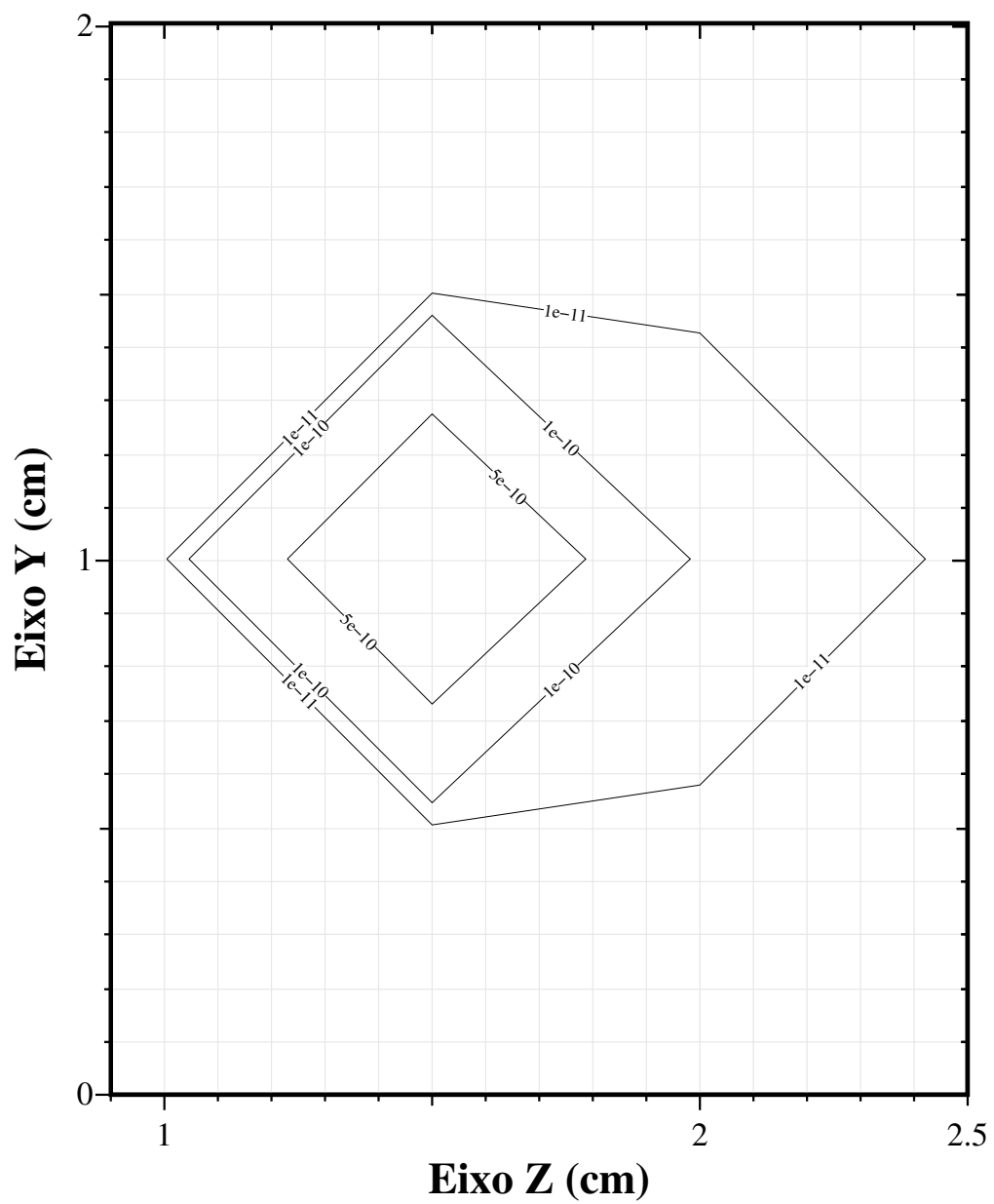


Figura 5.2: Gráfico em isolinhas do núcleo de convolução primário obtido por meio de simulação de Monte Carlo. Os números nas isolinhas indicam a intensidade em Gy/part.

elásticas. Caso o número seja menor, o modelo de Bethe não é mais válido, a subrotina é desligada e nenhuma outra correção é feita. Este fato implica em não corrigir a trajetória da partícula carregada. Quando reduzimos as dimensões das células, a probabilidade da trajetória de um elétron ultrapassar uma interface entre células aumenta, e a cada vez que um elétron alcança uma interface, o seu transporte é interrompido antes que ocorra o número mínimo de colisões para a devida correção pelo múltiplo espalhamento. Assim os dados resultantes da simulação não seriam muito confiáveis.

Para testar esta condição, o EGS4 dispõe de uma variável chamada de NOSCAT, que mostra o número total de vezes em que a subrotina de múltiplo espalhamento foi desligada.

O teste de resolução consistiu em simular o núcleo de convolução primário em diversos tamanhos de células. A extensão do meio foi a mesma da seção anterior e o número de histórias foi reduzido a 10^5 por uma questão de tempo de CPU. Os resultados estão na tabela 5.1.

Dimensões das células	NOSCAT
$0,5 \times 0,5 \times 0,5 \text{ cm}^3$	44.478
$0,2 \times 0,2 \times 0,2 \text{ cm}^3$	53.136
$0,1 \times 0,1 \times 0,1 \text{ cm}^3$	164.936

Tabela 5.1: Os testes para os limites de resolução.

Notamos um brusco aumento no número de vezes em que essa rotina é desligada quando passamos de 0,2 cm de lado para 0,1 cm. Concluimos que a melhor resolução possível para células cúbicas é de 0,2 cm de lado.

No entanto não aproveitaremos, nesta tese, os dados das células cúbicas de 0,2 cm de lado pois tal procedimento gera uma quantidade muito grande de pontos durante a convolução, necessitando de $(2,5)^3$ vezes mais memória RAM que as células cúbicas de 0,5 cm!

5.1.2 O núcleo de deposição de energia secundária

Para esta simulação as dimensões do tanque são $30 \times 30 \times 30 \text{ cm}^3$ e as células têm $0,5 \times 0,5 \times 0,5 \text{ cm}^3$, também. O tempo de CPU dedicado a esta simulação foi de aproximadamente 4,6 horas. A seguir apresentamos os resultados da simulação do núcleo de convolução secundário.

Na figura 5.3 vemos o perfil da deposição da dose ao longo do eixo z atravessando o pico de todo o conjunto de dados, $5,266 \times 10^{-11}$ gray/partícula. O gráfico tem seu eixo de intensidades em escala logarítmica para conseguirmos ver toda a extensão em que a energia é espalhada. Na seqüência temos um corte em representação de isolinhas, mostrado na figura 5.4.

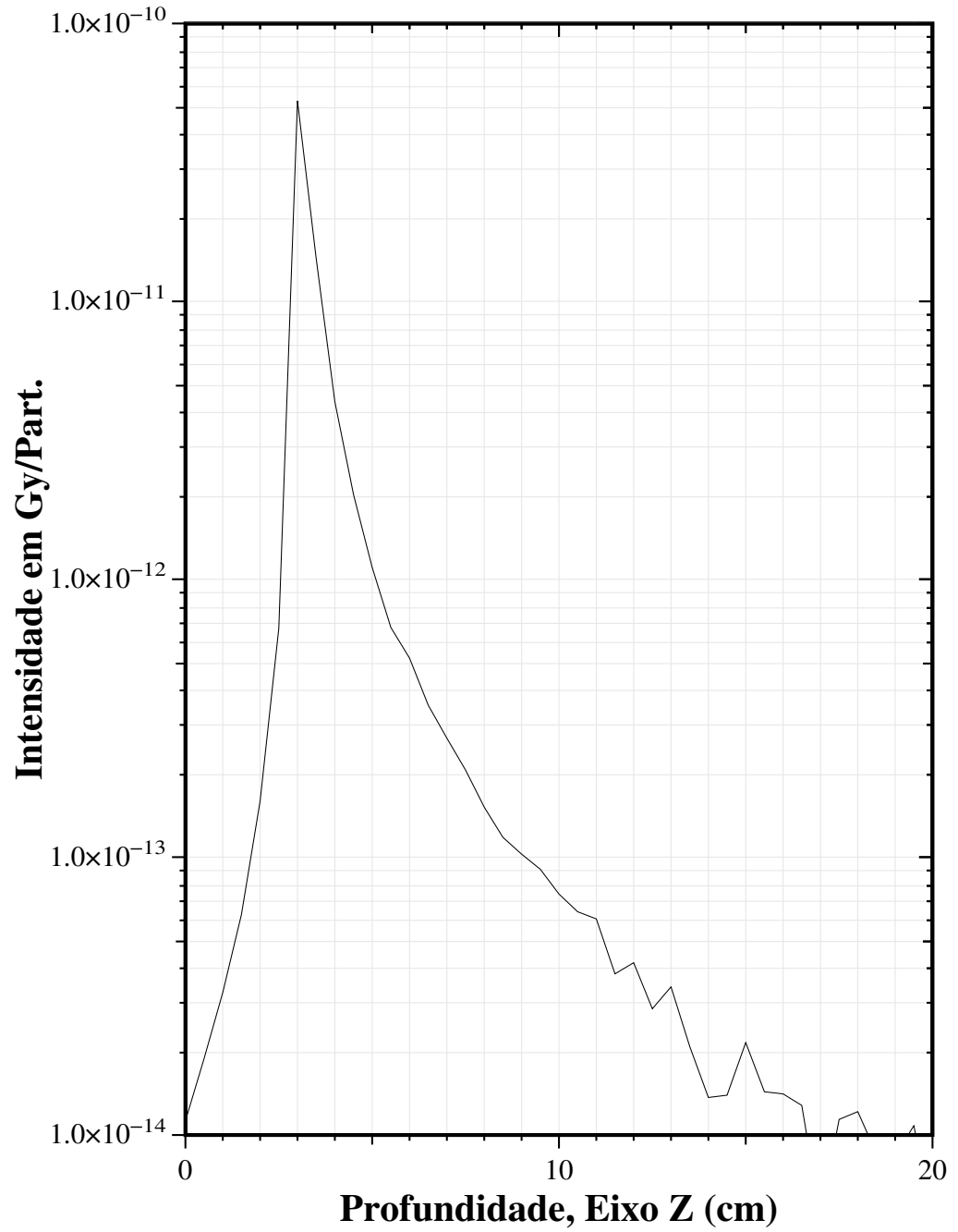


Figura 5.3: Perfil no eixo central da dose depositada pelos elétrons secundários.

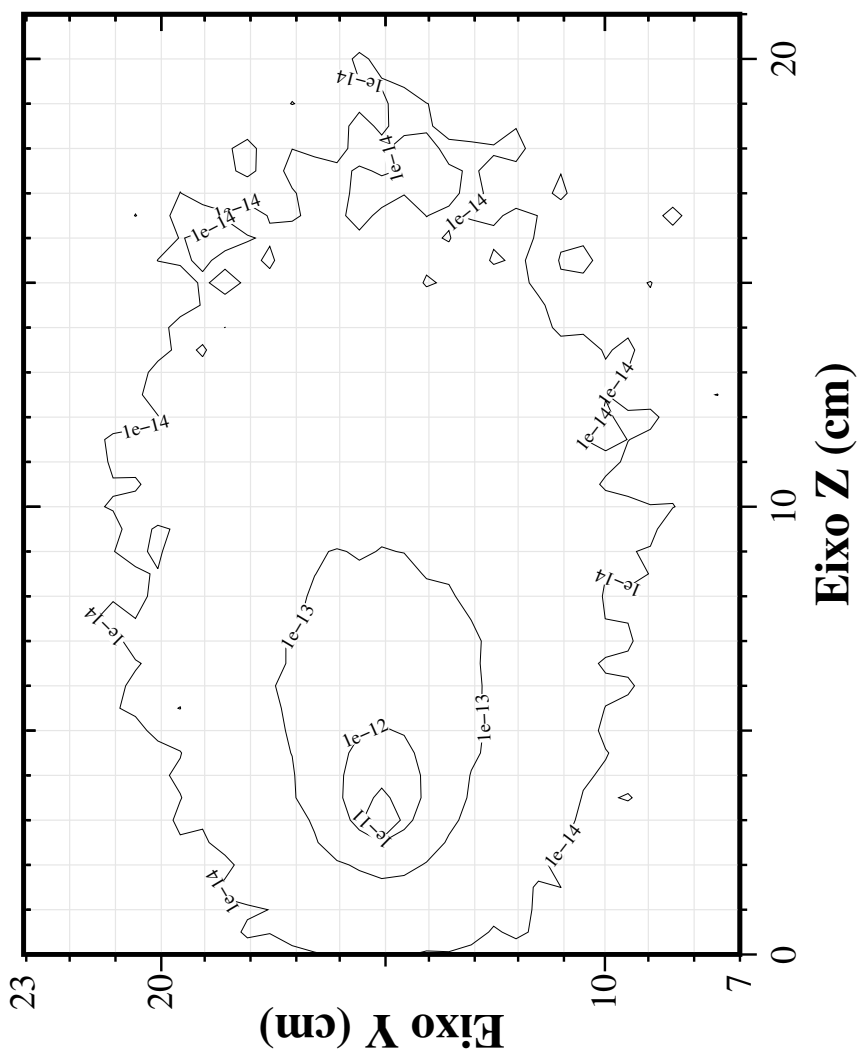


Figura 5.4: Gráfico em isolinhas de um corte do núcleo secundário. Os números nas isolinhas indicam a intensidade em Gy/part.

Nestes dois gráficos observamos algum ruído que aumenta com a distância ao pico da distribuição. A incerteza máxima nesta simulação ficou em torno de 11% para os dados periféricos, e em 10^{-13} gray/partícula a incerteza ficou em aproximadamente 0,6%.

5.1.3 O núcleo de deposição de energia devido ao múltiplo espalhamento dos fótons

A extensão do meio usado nesta simulação foi a mesma que para o núcleo secundário. O tempo de CPU para esta simulação foi de 6 horas. Nas figuras 5.5 e 5.6 apresentamos os resultados desta simulação.

Na figura 5.5 observamos o pico de todo o conjunto de dados, $2,3 \times 10^{-10}$ gray/partícula. Notamos também que este pico é maior que o do secundário devido, principalmente, ao maior número de fótons que contribuíram para a sua formação. A incerteza máxima ficou em torno de 11% nas células mais externas e foi de aproximadamente de 0,6% em 10^{-13} gray/partícula. No gráfico do perfil a incerteza observada é claramente maior que 11% porque as células vizinhas também possuem uma incerteza próxima a esta, o que sugere oscilações maiores que a incerteza individual. O mesmo raciocínio vale para o núcleo secundário.

Na figura 5.6 vemos que a energia no núcleo de múltiplo espalhamento estende-se por uma região ainda maior que no núcleo secundário. Esta extensão da energia absorvida no núcleo de múltiplo espalhamento é maior porque contabilizamos ordens superiores a três espalhamentos de fótons.

5.2 Os cálculos da dose de radiação

Implementamos o algoritmo de cálculo da dose de radiação por convolução apresentado no capítulo 4 e a listagem deste programa se encontra no apêndice C. Fizemos o teste do algoritmo em várias situações em meios homogêneos e heterogêneos. Em todas as situações calculadas pelo método de convolução o meio foi discretizado em células cúbicas de 0,5 cm de lado em uma matriz 3D fixada em $64 \times 64 \times 64$ células⁴. Portanto o meio descrito é um cubo de $32 \times 32 \times 32$ cm³.

Usamos a água como meio homogêneo em todos os cálculos, e nas montagens heterogêneas a água também foi muito usada.

⁴Usamos 2^6 células em cada direção apenas porque a FFT apresenta o melhor desempenho.

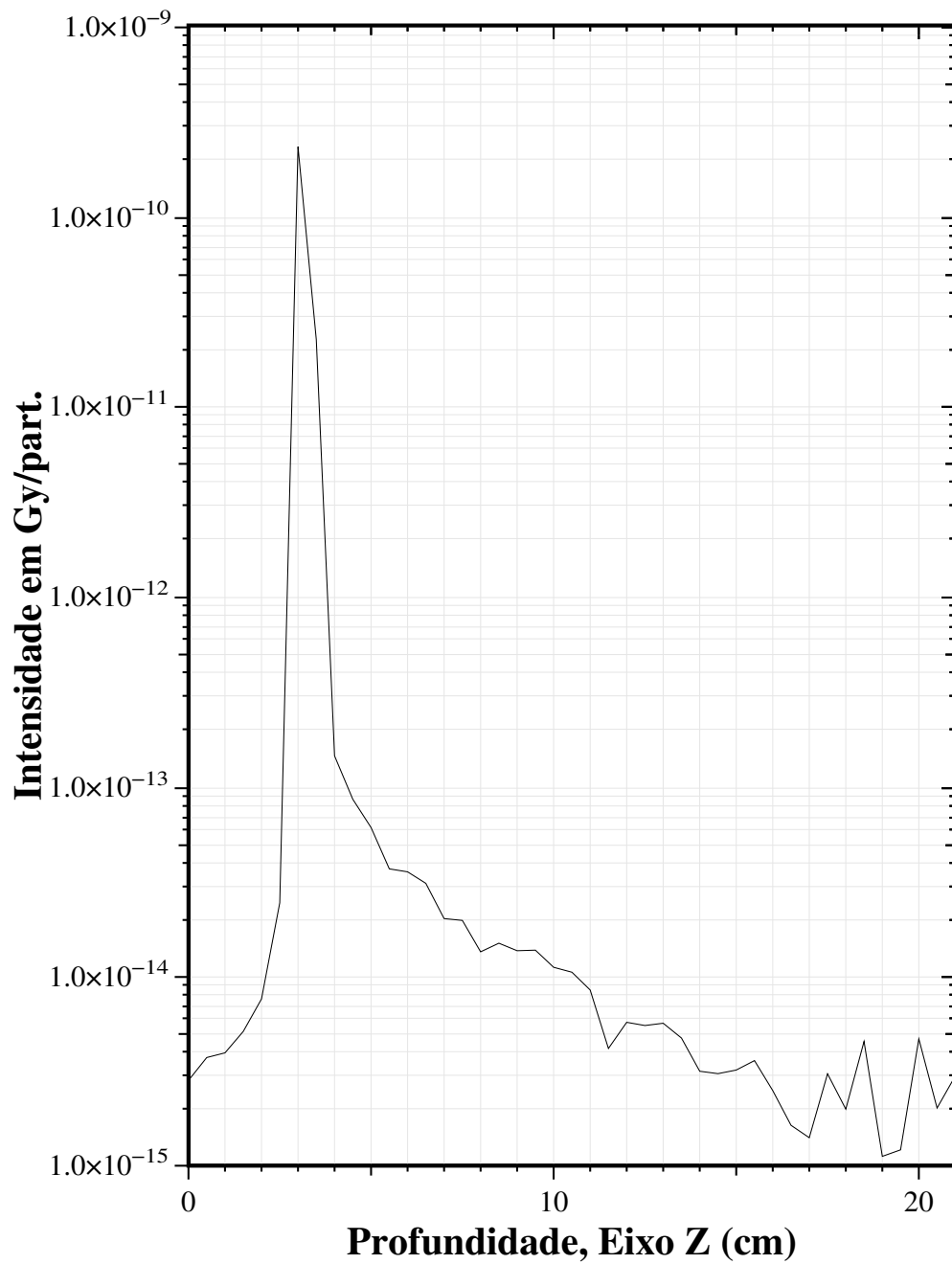


Figura 5.5: Perfil do núcleo de múltiplo espalhamento.

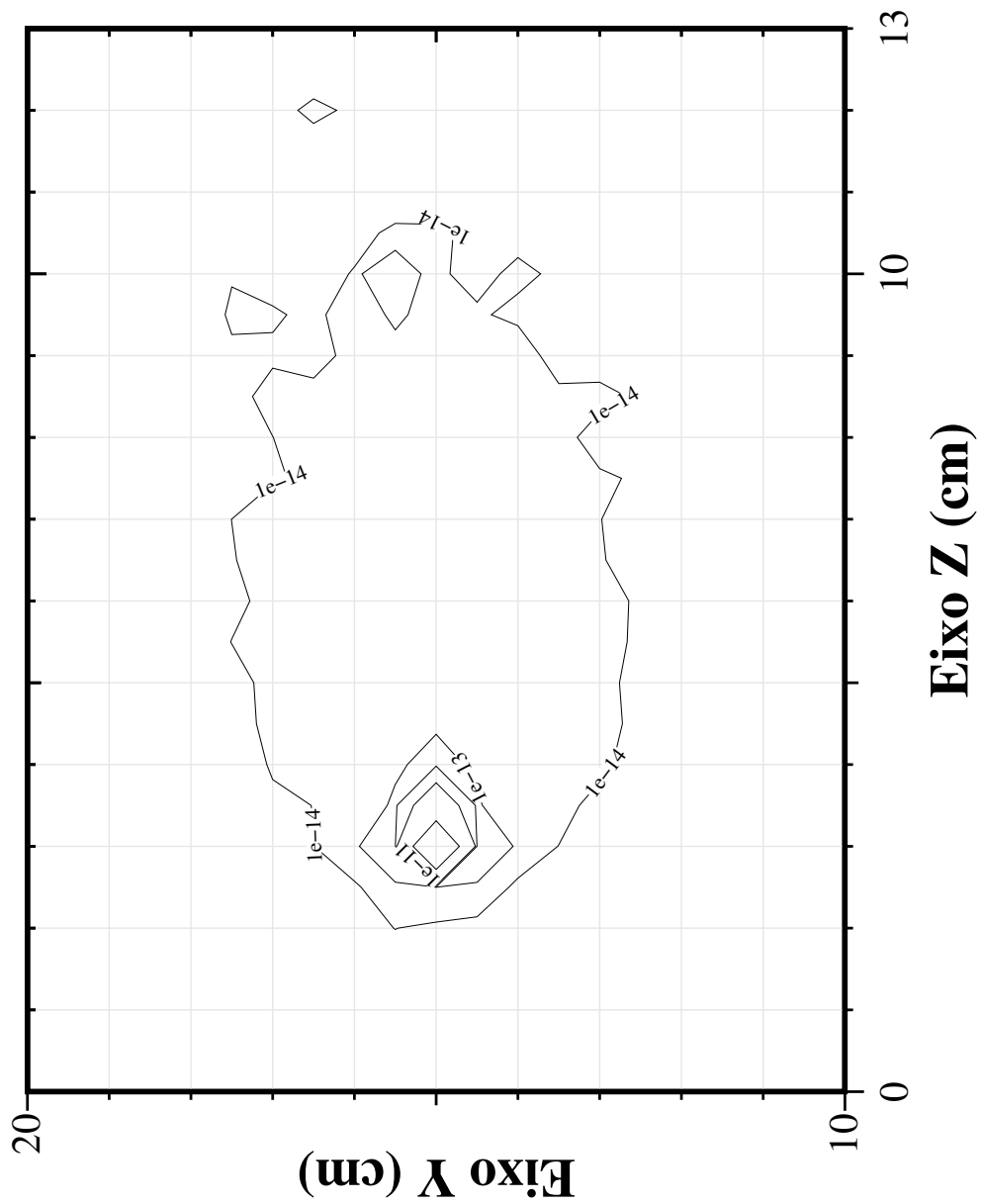


Figura 5.6: Curvas em isolinhas de um corte do núcleo de múltiplo espalhamento. Os números nas isolinhas indicam a intensidade em Gy/part.

5.2.1 Os testes em meios homogêneos

Dividimos em duas partes os testes propostos para meios homogêneos. Na primeira parte comparamos o algoritmo apresentado nesta dissertação com medidas feitas no CAISM, e na segunda comparamos com os resultados calculados pelo programa PLATO da Nucletron. Este programa usa os perfis transversais⁵ de dose medidos na água quando irradiados pela máquina de ^{60}Co ⁶.

5.2.1.1 Comparação com as medidas feitas no CAISM

O primeiro teste proposto é bastante simples: as medidas foram feitas aplicando um campo quadrado de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ na superfície do tanque de água dado por uma fonte a 80 cm de distância da superfície.

Mostramos a curva da fluência em perspectiva onde no eixo z está a intensidade normalizada a 100%. Note que não há divergência geométrica do feixe neste cálculo, mas consideramos normalmente a queda com o inverso do quadrado da distância. Esta normalização do máximo das curvas a 100% será um procedimento muito usado a partir deste ponto e, por isso, vamos citar somente os casos em contrário.

A distribuição da dose calculada para esta fatia de fluência está na figura 5.8.

As imagens em 3D mostradas aqui terão sempre a intensidade no eixo das ordenadas. Este tipo de imagem nos permite ter uma idéia do comportamento da intensidade sobre um plano, mas imagens em isolinhas são mais quantitativas. Como exemplo, veja a mesma imagem mostrada na figura 5.8 agora em curvas de isodose: As respectivas curvas de isodose para as doses parciais primária, secundária e de múltiplo espalhamento estão nas figuras 5.10, 5.11 e 5.12, onde todas as parcelas estão normalizadas com relação ao seu próprio pico.

A dose primária assemelha-se à fluência primária porque a extensão do transporte eletrônico da dose é pequena, e a maioria dos elétrons primários tem alcance de 0,5 cm, como podemos ver no gráfico da figura 5.1.

O transporte das doses secundárias e de múltiplo espalhamento é feito principalmente pelos fótons, por isso a extensão destas doses parciais é maior que a da dose primária, como conferimos nas figuras 5.11 e 5.12.

Vamos fazer uma comparação quantitativa do perfil da dose no eixo central do campo com dados experimentais.

⁵O perfil transversal é o perfil da dose, medido na direção perpendicular ao feixe de fótons.

⁶Na realidade não sabemos ao certo o método pelo qual este programa calcula as isodoses, porque o PLATO é um programa comercial fechado e o manual técnico pouco fala a este respeito.

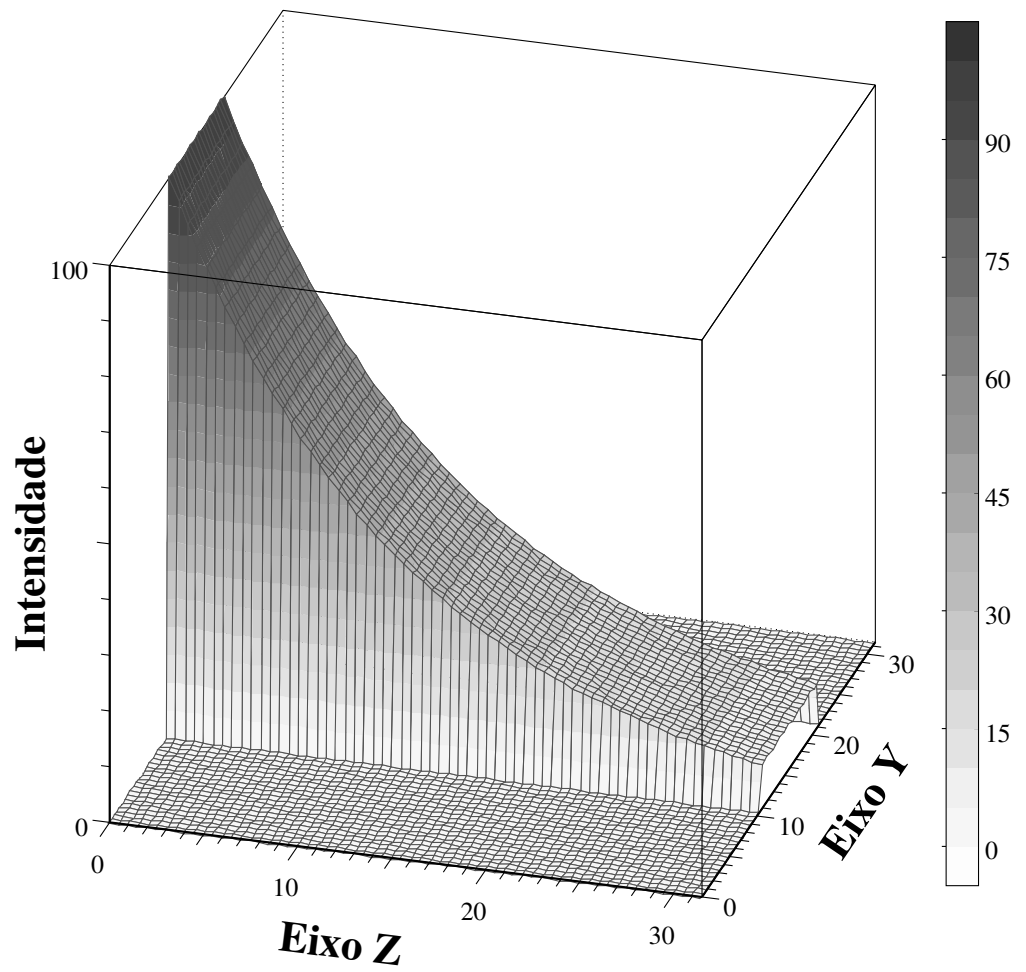


Figura 5.7: Vista em perspectiva da fluência primária dada pelo corte no plano x no centro do campo. O pico de intensidade foi normalizado a 100%.

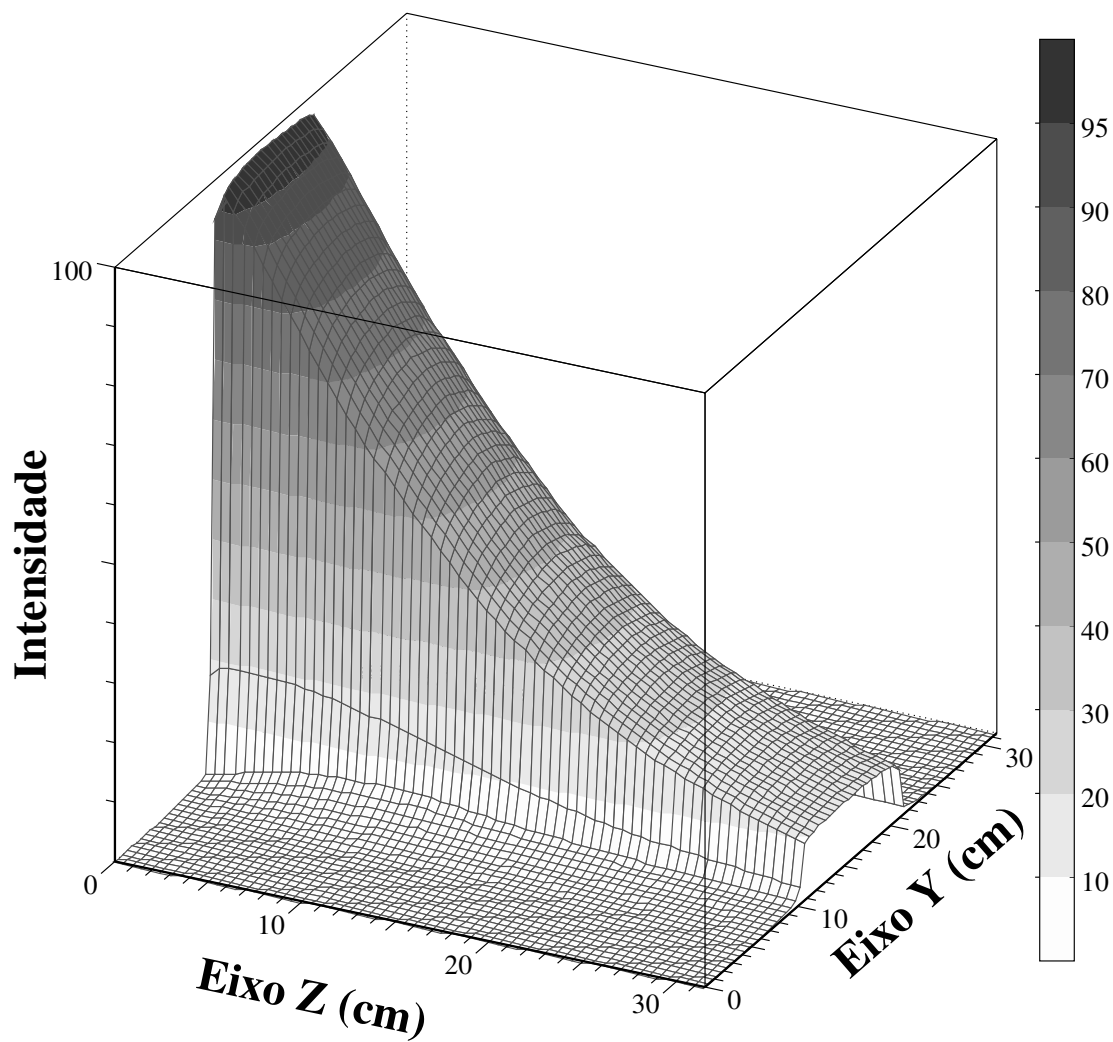


Figura 5.8: A dose total vista em perspectiva.

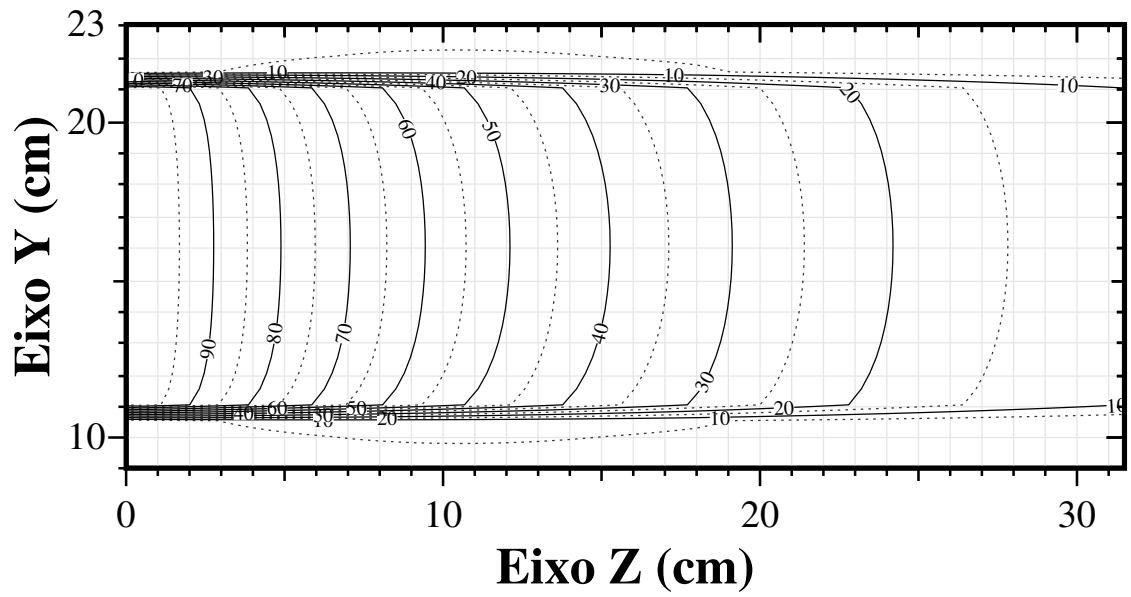


Figura 5.9: Curvas de isodose na água.

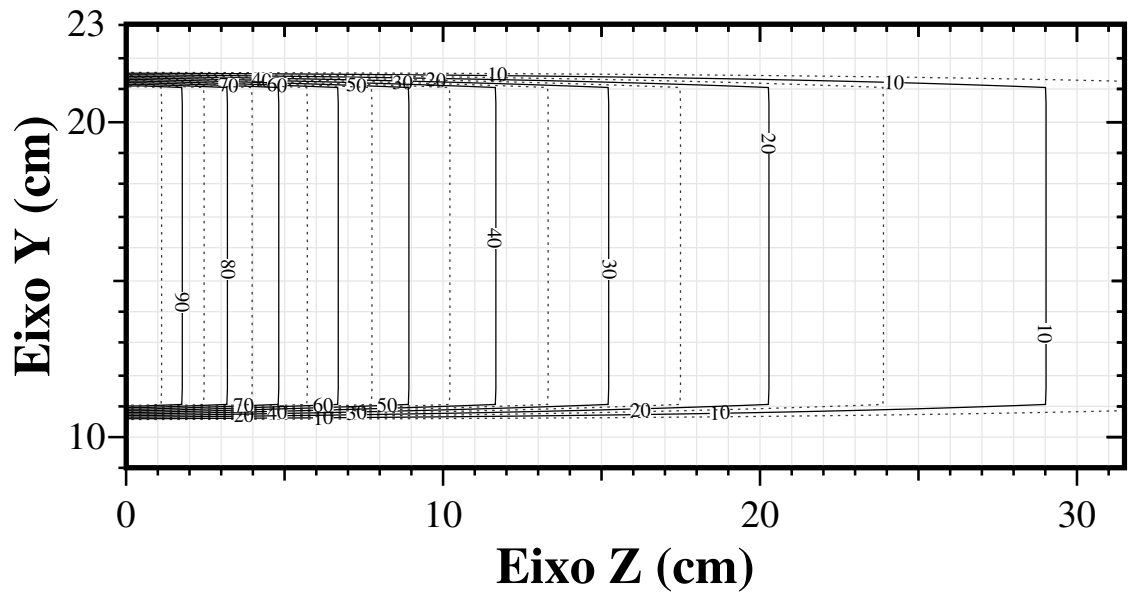


Figura 5.10: Curvas em isodose da dose primária.

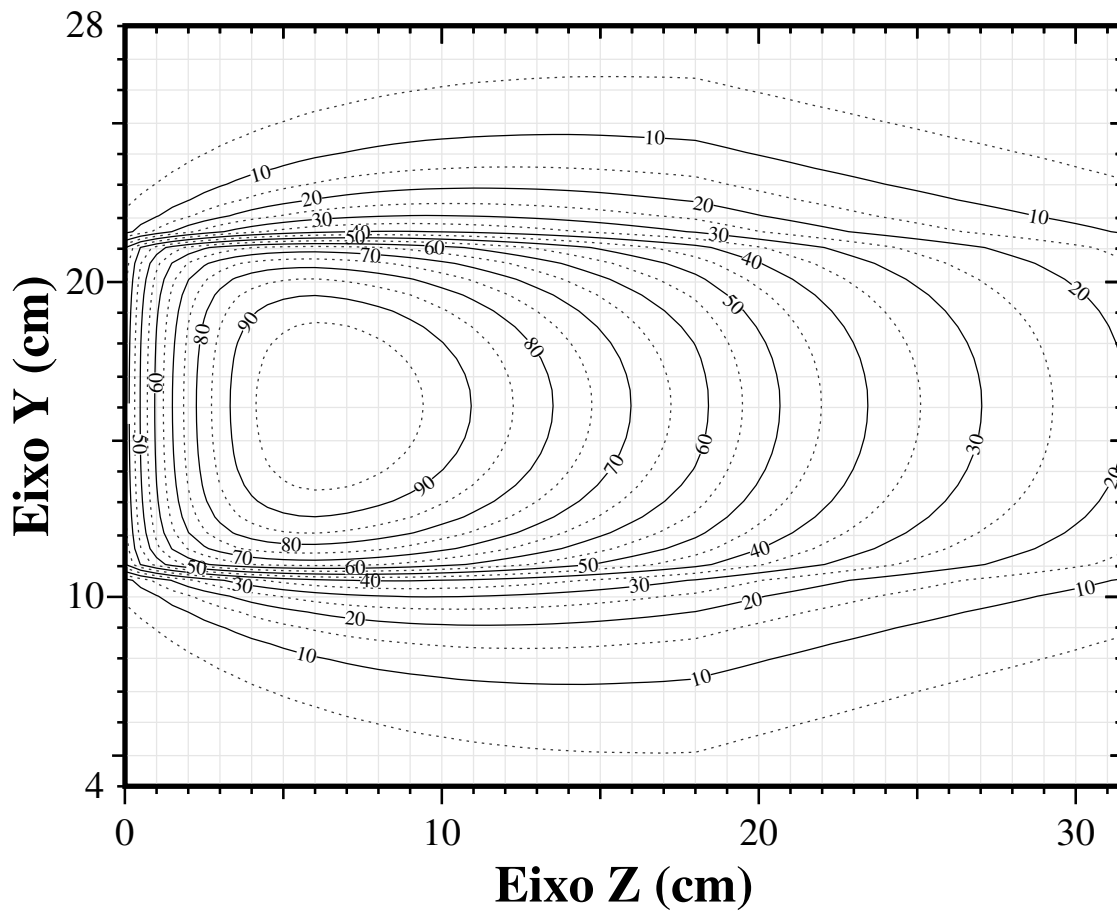


Figura 5.11: Curvas em isodose da dose secundária.

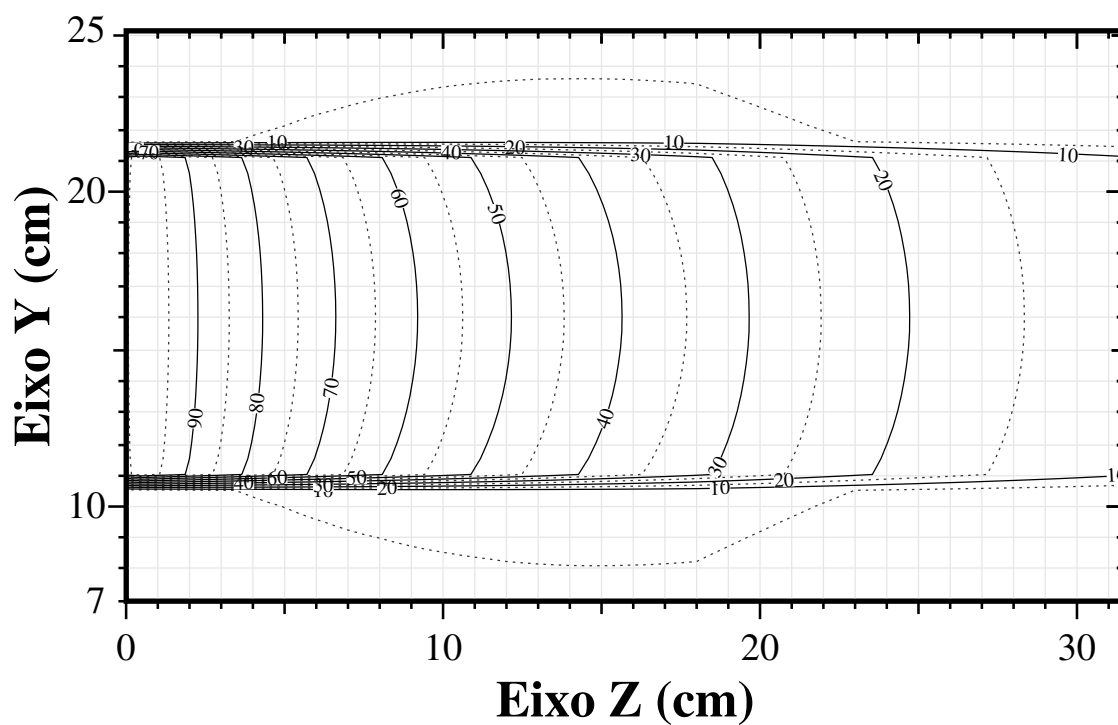


Figura 5.12: Curvas em isodose da dose de múltiplo espalhamento.

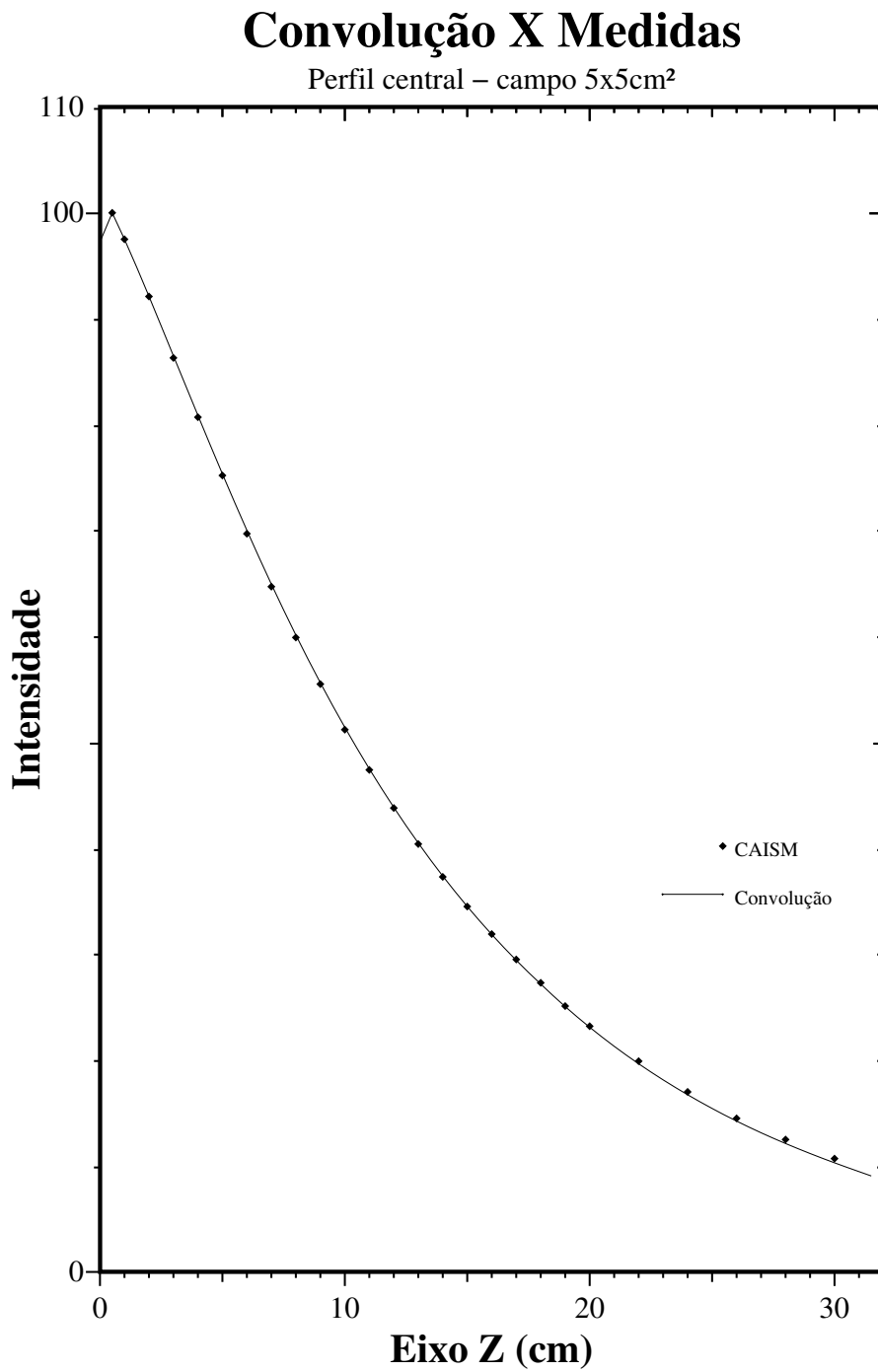


Figura 5.13: Comparação do perfil da dose em profundidade para campo $5 \times 5 \text{ cm}^2$ com dados experimentais do CAISM.

Convolução X Medidas

Perfil central – campo $8 \times 8 \text{ cm}^2$

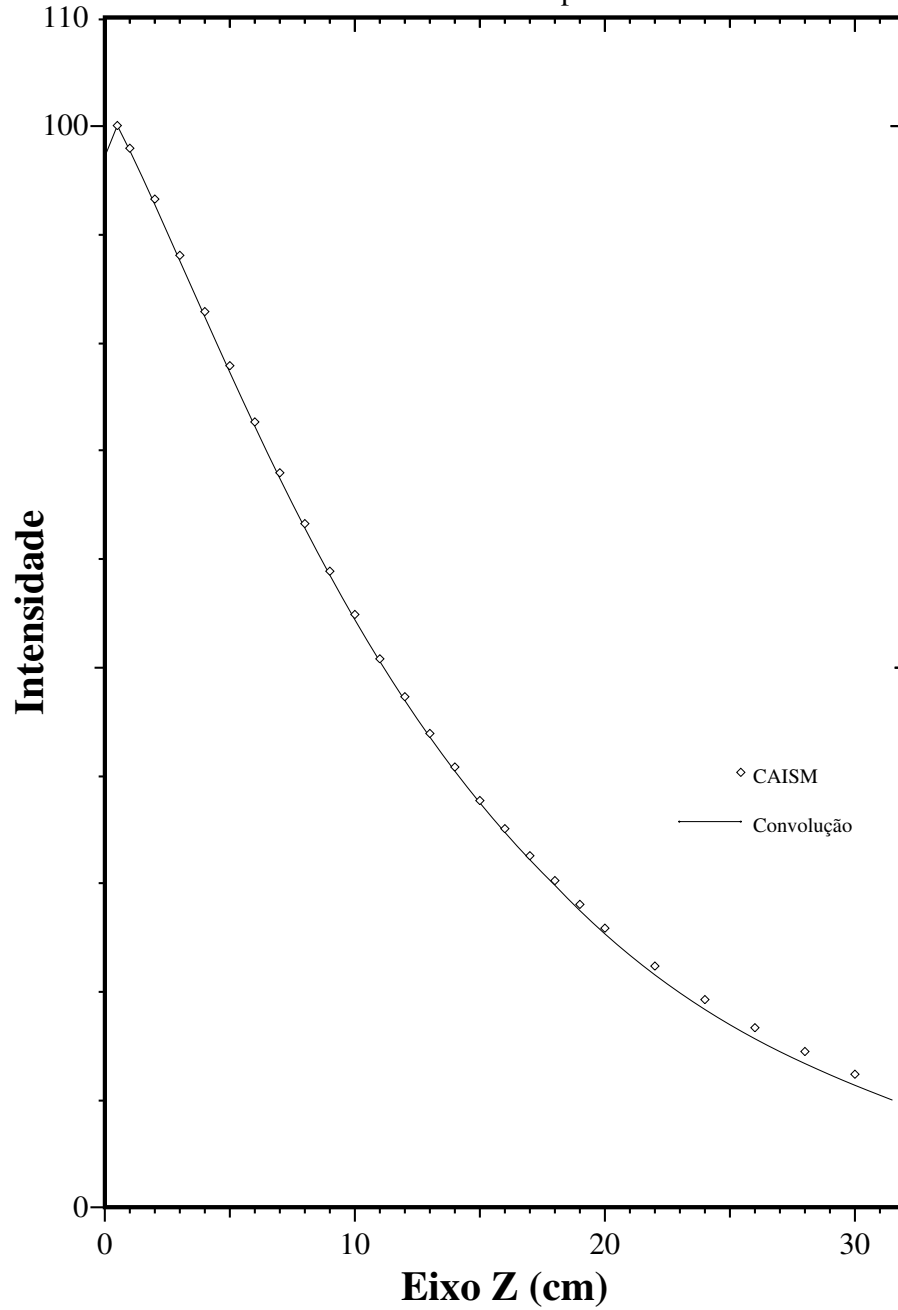


Figura 5.14: Comparação do perfil da dose em profundidade para campo $8 \times 8 \text{ cm}^2$ com dados experimentais do CAISM.

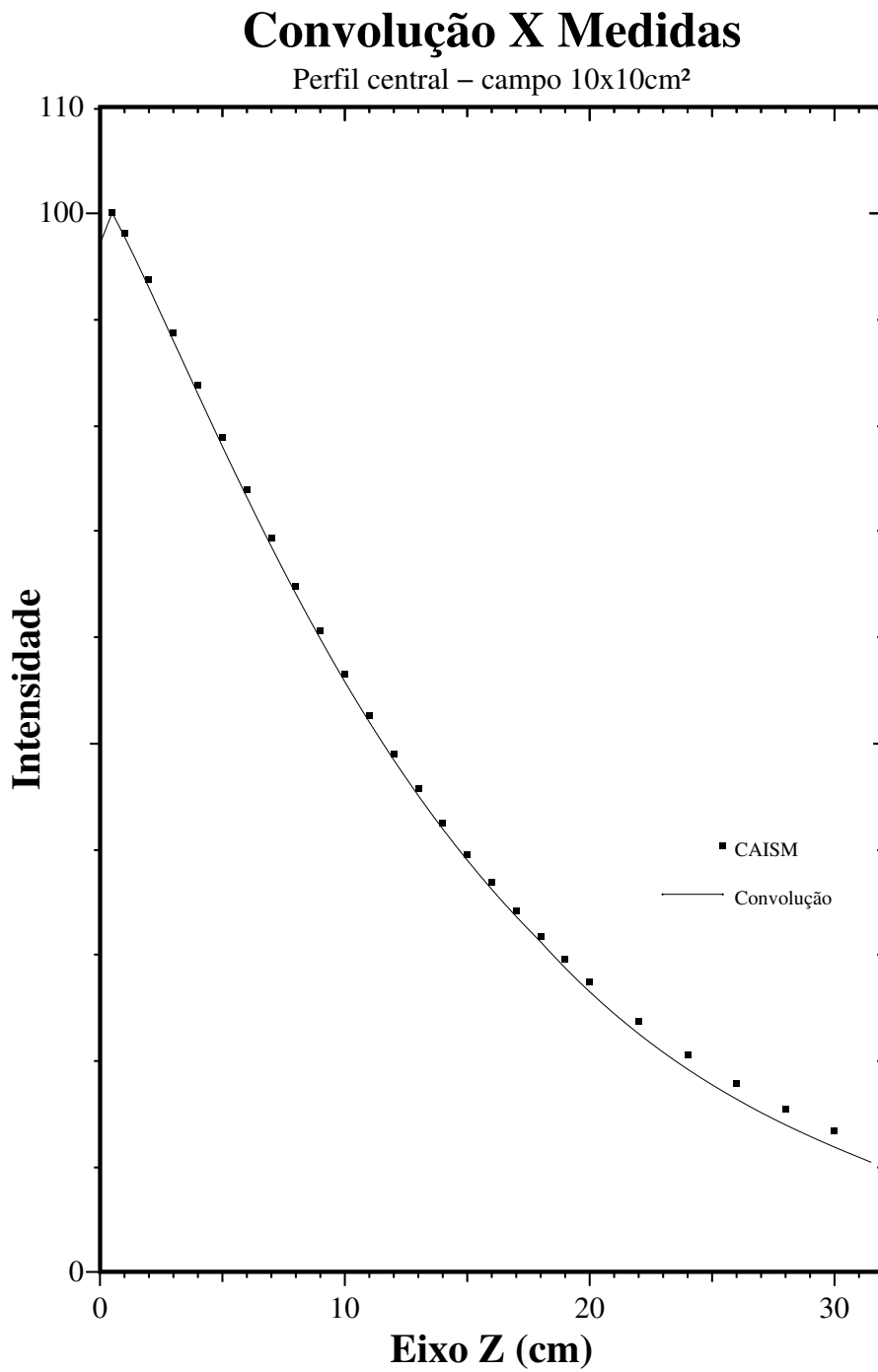


Figura 5.15: Comparação do perfil da dose em profundidade para campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ com dados experimentais do CAISM.

Convolução X Medidas

Perfil central – campo 15x15cm²

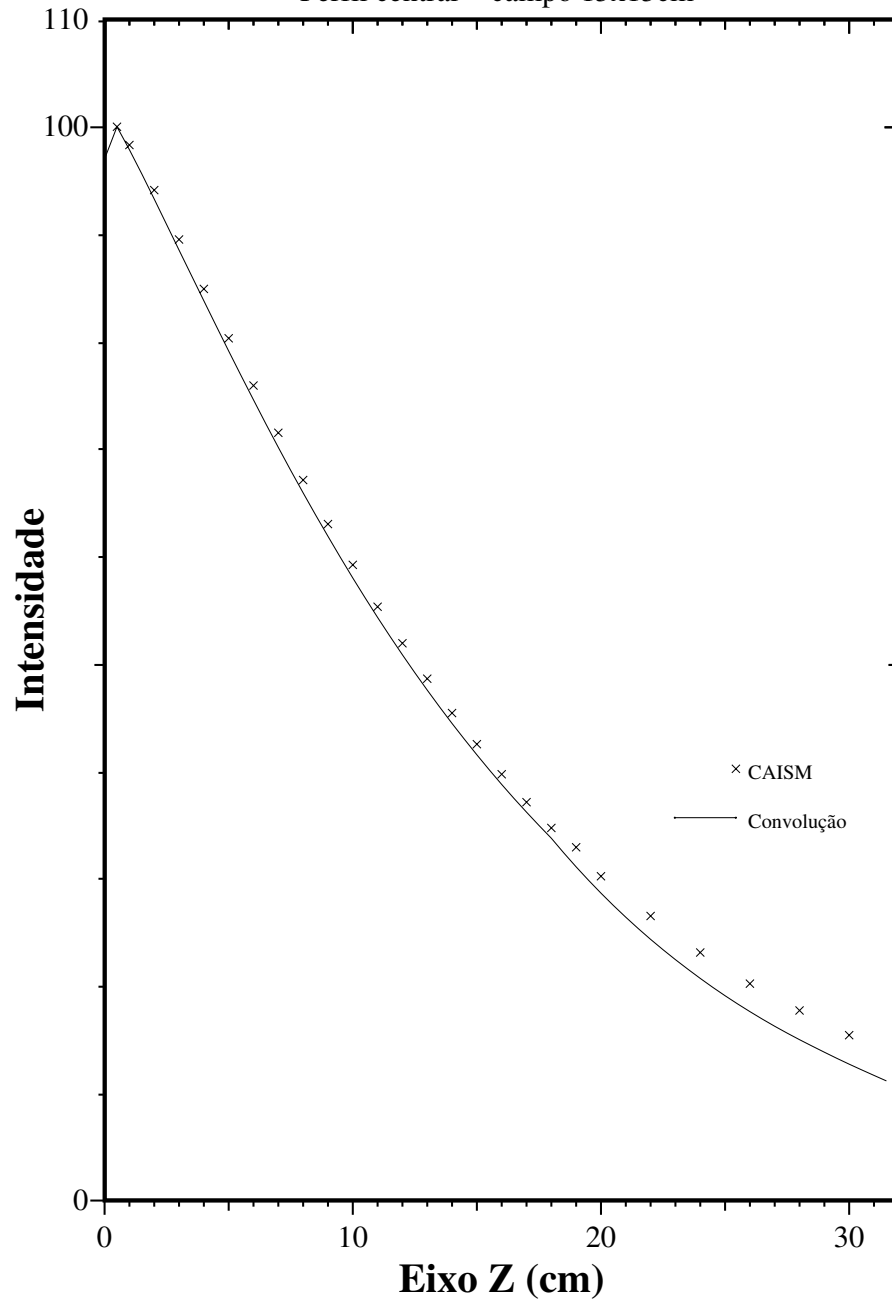


Figura 5.16: Comparação do perfil da dose em profundidade para campo $15 \times 15 \text{ cm}^2$ com dados experimentais do CAISM.

As medidas usadas nestes gráficos foram feitas na máquina de teleterapia ALCYON-II para uso do CAISM. O erro experimental está estimado em menos de 1%. Consideramos a divergência geométrica nos cálculos por convolução. A distância da fonte à superfície (SSD) desta máquina é de 80 cm, e este foi o valor usado nas simulações.

Observamos uma excelente concordância dos resultados calculados para campos menores que $10 \times 10 \text{ cm}^2$ com os valores experimentais. O erro relativo está próximo ao das medidas até a profundidade de 24 cm para o campo de $5 \times 5 \text{ cm}^2$, de 17 cm para o campo de $8 \times 8 \text{ cm}^2$.

O erro relativo entre o cálculo e os dados experimentais do campo $5 \times 5 \text{ cm}^2$ a 28 cm de profundidade foi de 3% e do campo $8 \times 8 \text{ cm}^2$ na mesma profundidade foi de 7,7%. O erro relativo é definido no apêndice A. Normalmente os artigos sobre o cálculo da dose por convolução comparam seus modelos com simulações ou valores experimentais e mencionam o erro absoluto, também definido neste mesmo apêndice. Tal método apresenta um valor para o erro muito menor e inadequado cientificamente⁷.

Escolhemos esta profundidade para fazer as comparações porque devemos sempre desconsiderar os dados que estão nos últimos 3 cm já que esta é a distância do pico ao início do conjunto de dados do núcleo secundário e também do de múltiplo espalhamento. Este cuidado é necessário para minimizar a influência dos pontos que estão além da borda inferior do tanque de água, e que não espalham radiação. Como o nosso meio tem 32 cm de profundidade, 28 cm é uma distância segura.

As doses calculadas e medidas para o campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ apresentam uma boa concordância para profundidades de até 15 cm. Em 28 cm a dose apresenta um erro relativo de 9,8%⁸, e observamos também uma tendência mais acentuada em subestimar o valor medido. Com um campo de $15 \times 15 \text{ cm}^2$ o erro relativo subiu para 15,4% a 28 cm, e chegou a 20% para um de $20 \times 20 \text{ cm}^2$ (não mostrado)!

A razão pela qual o perfil da dose calculada no eixo central do campo discorda tanto dos resultados experimentais é encontrada quando analisamos a extensão do meio onde foram simulados os núcleos secundário e de múltiplo espalhamento. Esta extensão não é grande o suficiente para que todos os fótons sejam absorvidos dentro do meio em que foram feitas as simulações. A figura 5.17 mostra porque campos maiores precisam de núcleos de convoluções mais extensos. O artigo [15] sugere que o meio em que simulamos tenha uma extensão física de pelo menos 60 cm de raio. Por limitações técnicas dos computadores e do EGS4 nós fizemos esta simulação em um cubo de 30 cm de lado, portanto a distância do feixe a qualquer lateral do cubo tem apenas 15 cm! O mesmo comentário vale para o núcleo

⁷Por exemplo, este erro relativo de 7,7% significa apenas 1,1% como absoluto.

⁸Este valor corresponde a 2,1% de erro absoluto.

secundário porque o livre caminho médio destes fótons é maior que as dimensões do meio.

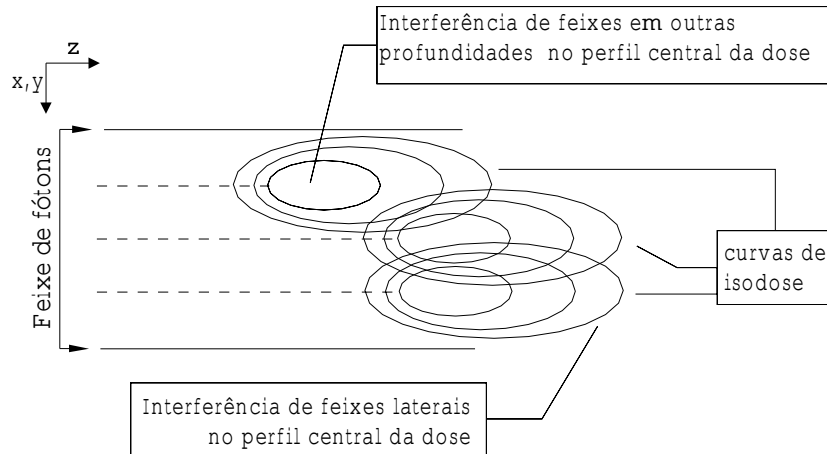


Figura 5.17: A composição da dose no eixo central pelos feixes de fótons vizinhos.

Nos gráficos mostrados nas figuras 5.18 e 5.19 temos uma comparação entre os perfis da dose absorvida transversal ao campo calculado e os dados da máquina ALCYON II. Nesta comparação ambos os resultados foram normalizados a 100%. Portanto, neste gráfico mostramos somente a concordância lateral da dose. O perfil transversal é dado pela dose perpendicular ao campo. Usamos um campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ e as profundidades mostradas são 0,5 cm e 20 cm, respectivamente. Nos cálculos numéricos consideramos a divergência geométrica do campo. Em ambos os gráficos observamos uma boa concordância. O modelo para a fluência ainda pode ser melhorado considerando a zona de penumbra, mas o ideal seria mapear o fluxo ou a fluência de fótons na superfície do meio em cada máquina e usá-lo nos cálculos, pois somente assim conseguiríamos corrigir as regiões afetadas pelo sistema de colimação [1]. Estas regiões aparecem claramente nas bordas inferiores e superiores do perfil do campo na figura 5.18.

Neste gráfico comparamos os perfis de dose total, primária, secundária e de múltiplo espalhamento no eixo central do campo $20 \times 20 \text{ cm}^2$. Na referência [3] o autor faz a mesma comparação onde, pelos cálculos teóricos para o modelo homogêneo, o perfil do múltiplo espalhamento deveria ter o mesmo valor numérico que o perfil secundário a partir de 20 cm de profundidade. Esta comparação é mais um indício de que estamos subestimando a dose total por perder energia, principalmente, no núcleo de múltiplo espalhamento.

Convolução X Medidas

Perfil da dose no eixo X, com $Z=0,5\text{cm}$

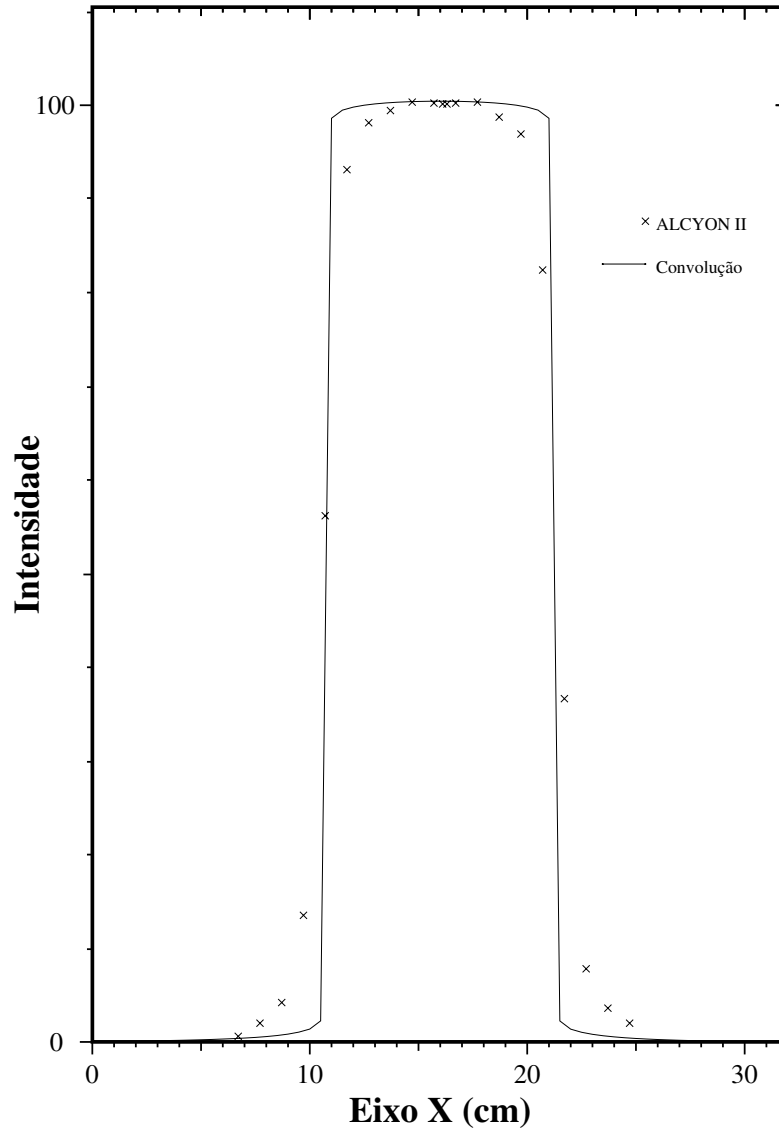


Figura 5.18: Comparação do perfil transversal da dose para o campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a $0,5 \text{ cm}$ de profundidade entre o modelo apresentado nesta tese e os dados obtidos da máquina ALCYON II.

Convolução X Medidas

Perfil da dose no eixo X, com Z=20cm

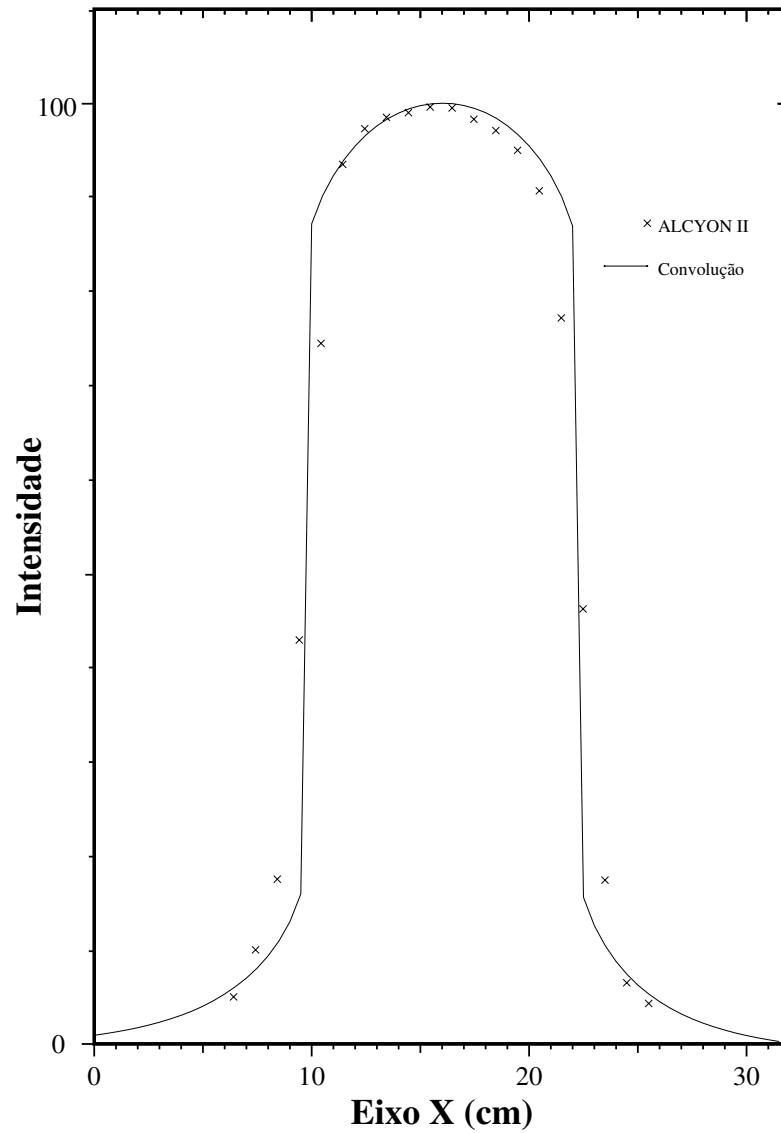


Figura 5.19: Comparação do perfil transversal da dose para o campo de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ a 20 cm de profundidade entre o método de convolução e os dados obtidos da máquina ALCYON II.

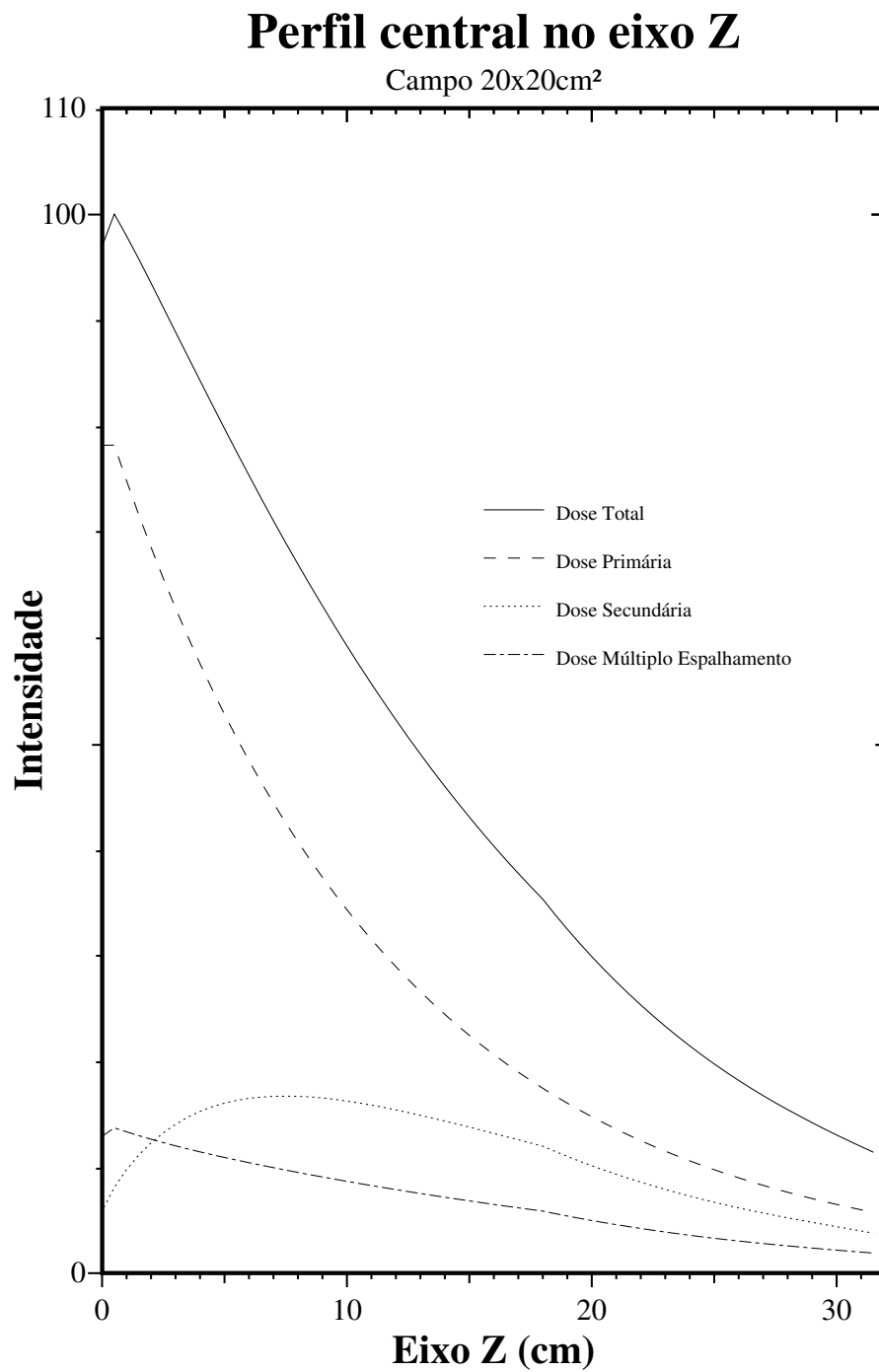


Figura 5.20: Os perfis das doses total e parciais.

5.2.1.2 Comparação com o programa PLATO

Vamos comparar o perfil de dose no centro do campo $10 \times 10 \text{ cm}^2$ calculado com o programa PLATO com o método de convolução descrito nesta tese. Excepcionalmente normalizamos o pico em 124,579% porque o programa PLATO tem problemas para normalizar o pico a 100%. Verificamos pelo gráfico 5.21 que a concordância está muito boa.

5.2.2 Os testes em meios heterogêneos

Como já citamos, é esperado que este algoritmo calcule bem apenas os elementos heterogêneos que tenham a mesma seção de choque que a água, mas densidades diferentes. Vamos então usar a situação mostrada na figura 5.22 para as comparações, onde uma fatia do tanque de água é substituída por um outro meio de densidade relativa $\rho = 0,25 \text{ g/cm}^3$, mas de mesma seção de choque que a água. Esta fatia de menor densidade pode ser considerada equivalente ao pulmão.

5.2.2.1 Comparação com a simulação no EGS4

Aplicamos um campo de $1 \times 1 \text{ cm}^2$ perpendicular à superfície do meio e obtivemos a curva de isodose no plano central apresentada na figura 5.23.

Usamos novamente o programa XYZP do EGS4, mas desta vez sem nenhuma modificação, para compararmos o resultado calculado pela convolução com o simulado. A qualidade da simulação depende diretamente do número de histórias. Usamos um feixe estreito de $1 \times 1 \text{ cm}^2$ para conseguir uma boa precisão, concentrando as partículas em uma área pequena. Desta forma a incerteza no perfil central do feixe foi menor que 1%. Para reduzir o tempo de simulação a valores aceitáveis (da ordem de algumas dezenas de horas) usamos células de $1 \times 1 \times 1 \text{ cm}^3$. É importante lembrar que o programa XYZP simula feixes de fótons paralelos, assim os cálculos por convolução foram feitos sem a queda com o inverso do quadrado da distância ($\text{SSD} = \text{infinito}$).

Notamos a excelente concordância com os resultados da simulação, sendo o desvio na profundidade de 24 cm menor que 1%. Nas interfaces com material de menor densidade o erro chegou a 2,7%. Esperamos que a discordância neste ponto seja realmente um pouco maior porque nesta região não há equilíbrio eletrônico. Este fenômeno ocorre porque a produção de elétrons livres depende diretamente da densidade do meio, assim o meio de menor densidade gera menos elétrons que o de maior. Portanto esperamos que a dose calculada dentro deste meio seja um pouco menor que a simulada em 5 cm (antes da segunda interface), e superior que a simulada em 6 cm. Esta previsão se confirma em 5 cm mas não em 6 cm porque as

Convolução X PLATO

Perfil central no eixo Z (SSD=80cm)

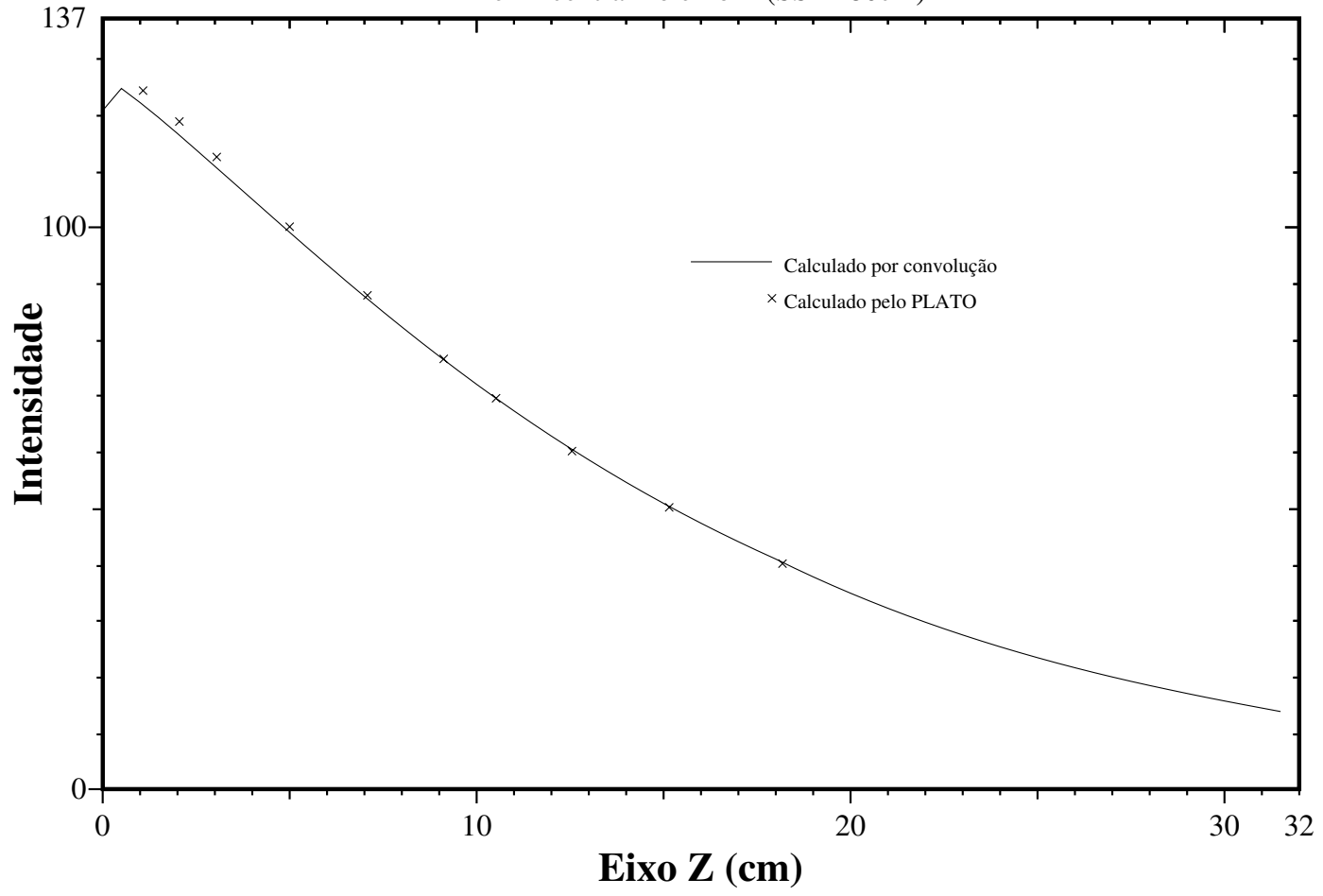


Figura 5.21: Comparação entre os resultados do PLATO e convolução.

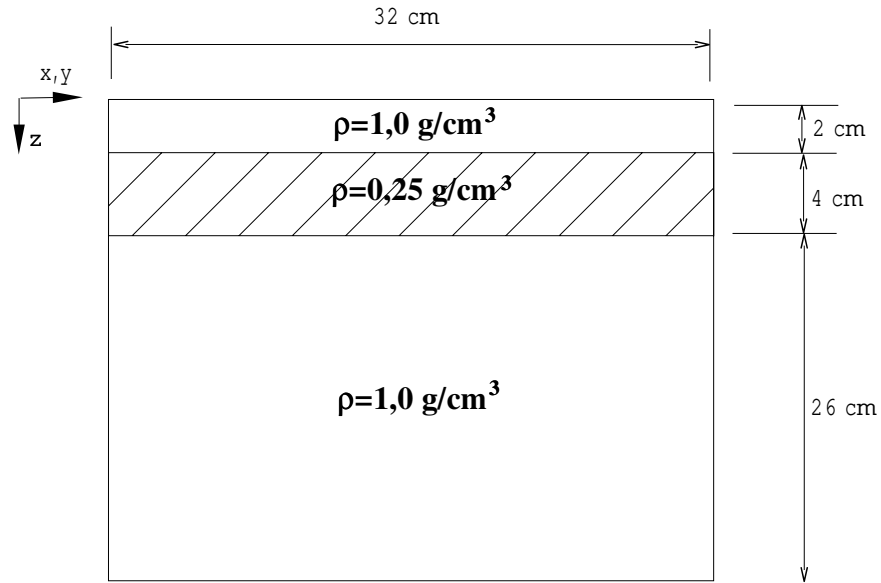


Figura 5.22: Situação proposta para simular o tecido do pulmão entre tecidos musculares.

células onde estão calculadas as doses são menores que as da simulação, e este fato interferiu na precisão. No entanto, os resultados apresentam-se muito bons.

5.2.2.2 Comparação com o programa PLATO

Para este teste o campo usado foi de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, SSD de 80 cm e consideramos a divergência geométrica. A normalização excepcionalmente foi feita em 104,67%. Apresentamos na figura 5.25 a comparação dos perfis de dose no centro do campo entre o calculado pelo algoritmo apresentado nesta tese e o calculado pelo PLATO.

No gráfico 5.25 comparamos os resultados do programa de convolução com o do PLATO. Pelo PLATO calculamos duas situações: a primeira segue exatamente a figura 5.22 e a segunda substitui a densidade do pulmão pela da água, ou seja, temos um meio homogêneo.

Este gráfico nos mostra claramente que o PLATO corrige a atenuação exponencial, porque os pontos após a região de $\rho = 0,25 \text{ g/cm}^3$ coincidem com o resultado da convolução, mas não corrige a dose nessa mesma região! Temos a certeza de que o PLATO realiza a correção exponencial quando comparamos o perfil de dose no meio homogêneo, por ele calculado, com o heterogêneo e vemos que o primeiro possui uma queda mais acentuada, como deveria ser.

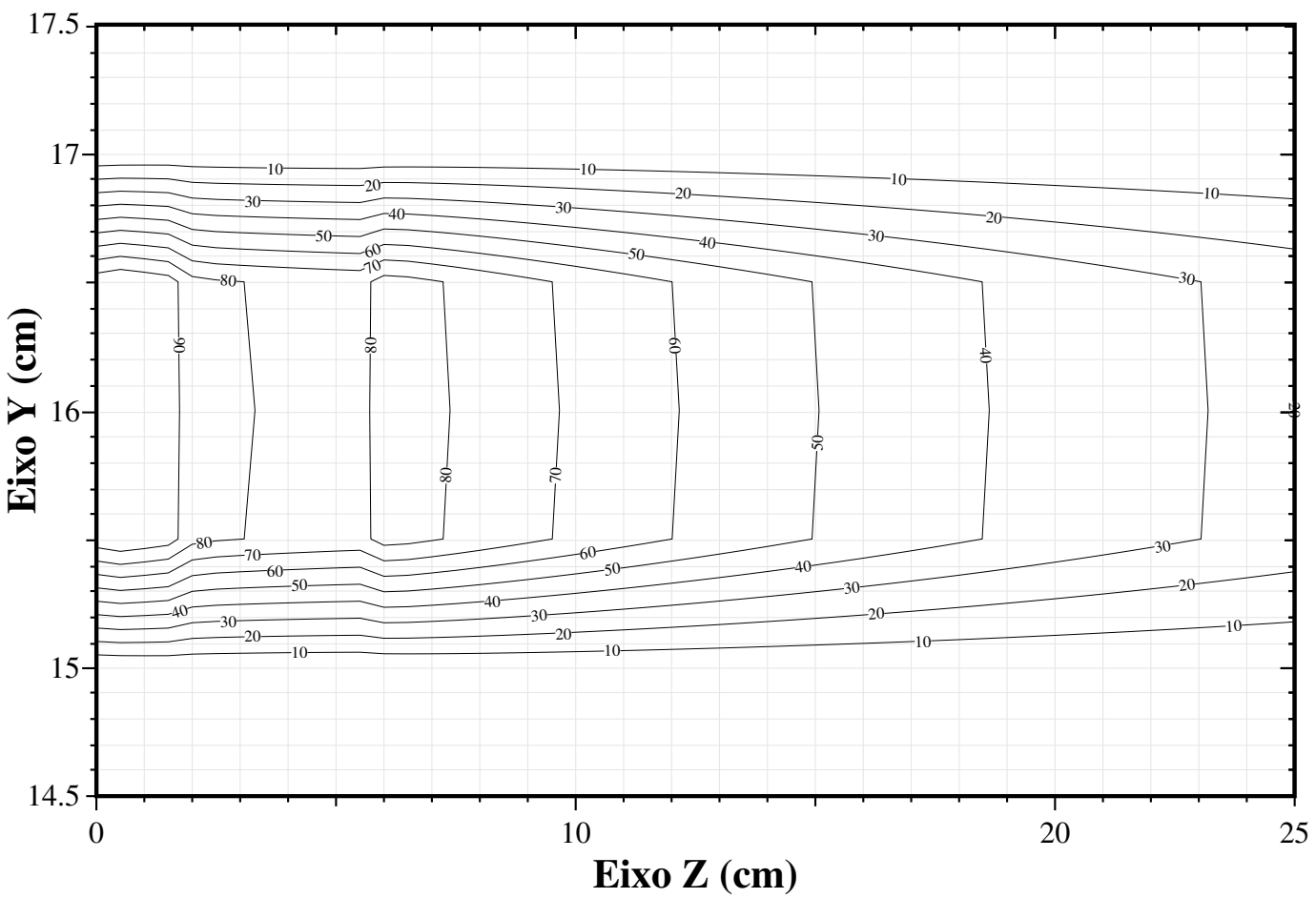


Figura 5.23: Curvas de isodose para o meio composto da figura 5.22 com campo de $1 \times 1 \text{ cm}^2$.

Convolução X EGS

Perfil central no eixo Z (SSD=inf.)

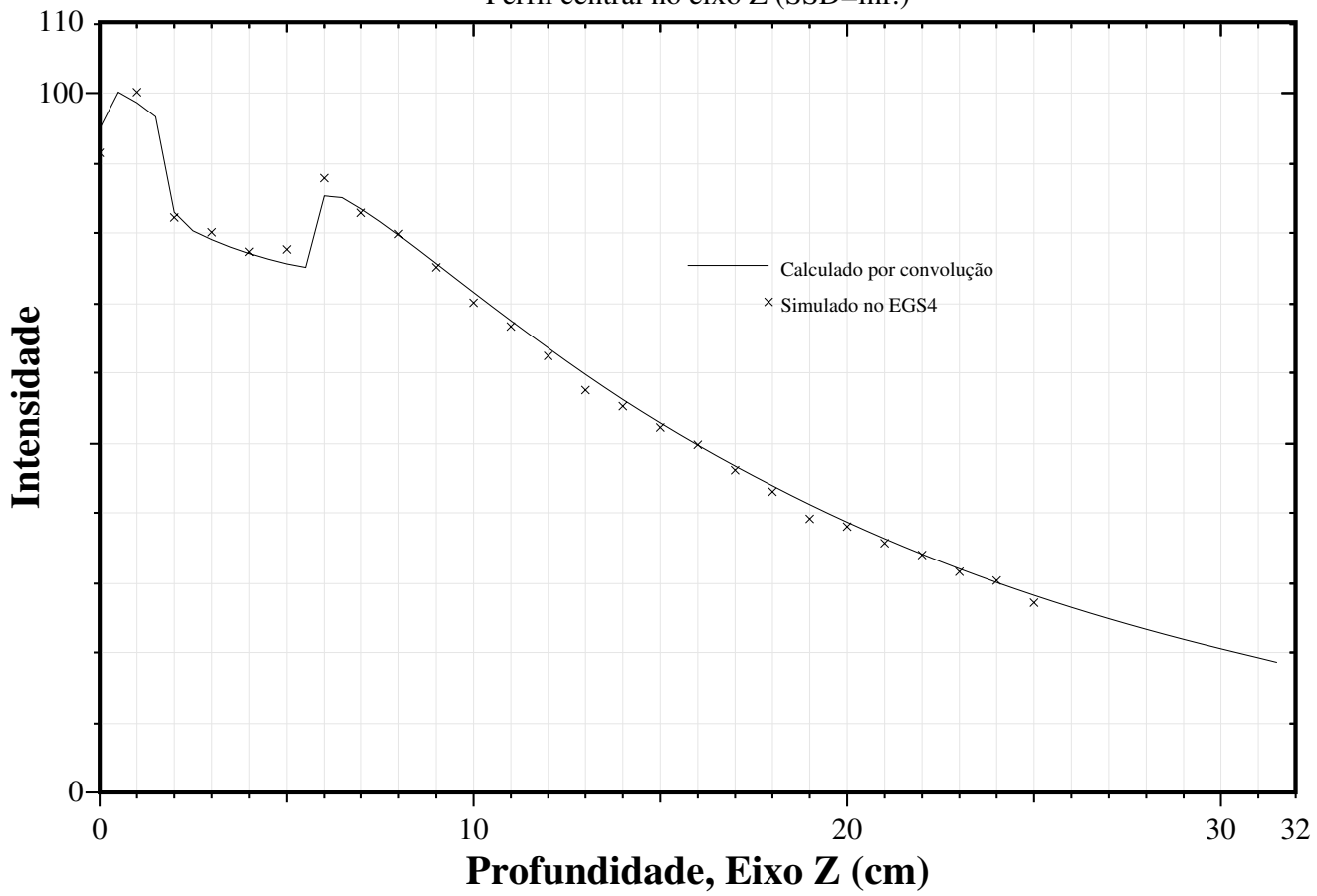


Figura 5.24: Comparação do perfil central da dose calculada por convolução contra os resultados da simulação.

Convolução X Programa atual

Campo 10x10 cm²

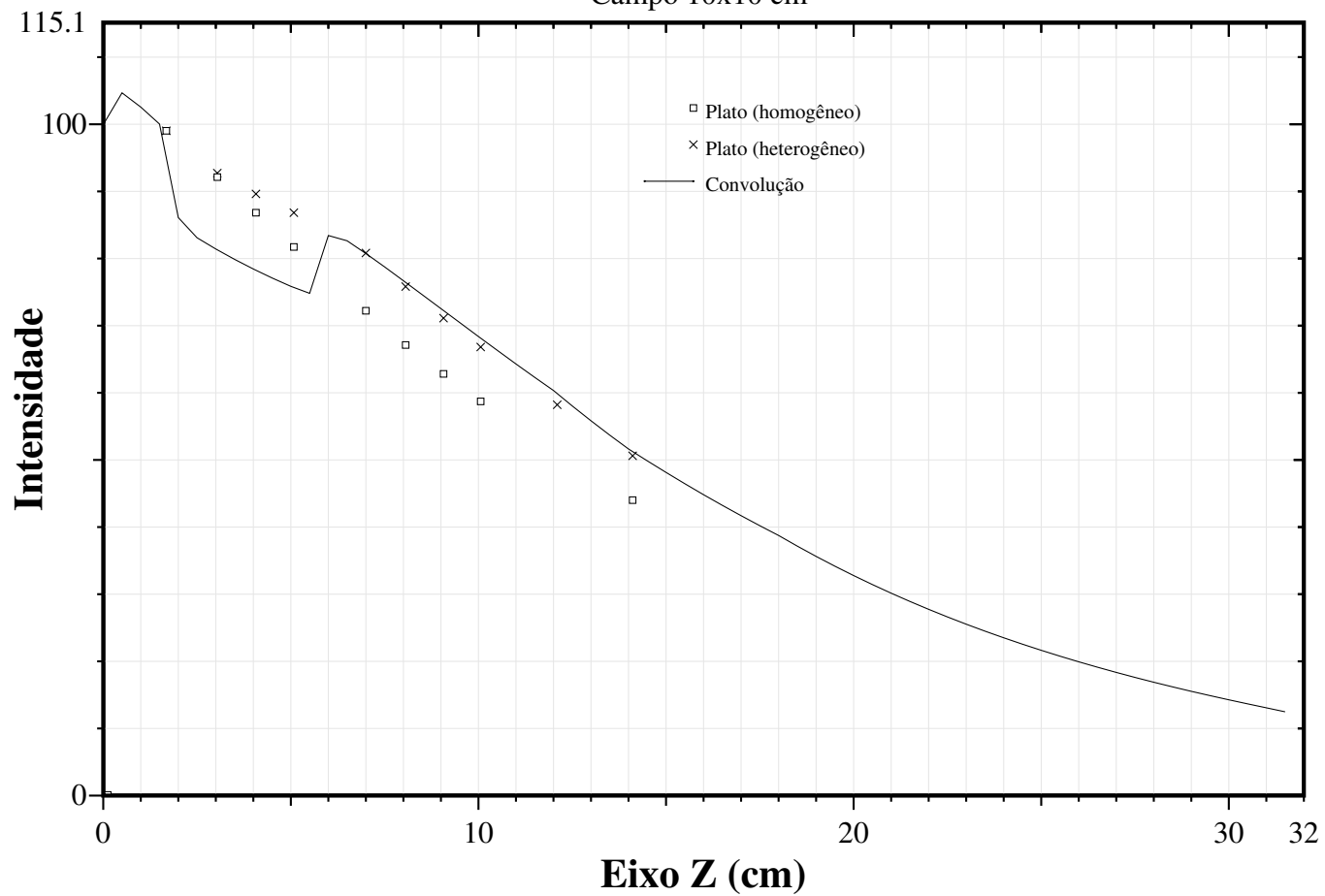


Figura 5.25: Comparação entre a convolução e o resultado do programa PLATO.

Capítulo 6

Conclusões

Nesta tese implementamos um algoritmo para cálculo da dose em meios heterogêneos usando convoluções [6]. Aplicamos a técnica de transformada de Fourier rápida (FFT) na implementação computacional deste algoritmo. Os núcleos de transporte e deposição de energia foram simulados usando um programa modificado por nós, o XYZP disponível no pacote do EGS4.

A implementação deste algoritmo apresentou excelentes resultados quando comparados com os dados experimentais medidos no CAISM e resultados de simulações no EGS4. A discordância do perfil da dose no eixo central do campo em profundidades maiores que 20 cm para grandes campos se deve, principalmente, ao pouco espaço reservado para o meio material onde foram simulados os núcleos secundário e de múltiplo espalhamento. Este espaço deveria conter pelo menos uma esfera de meio material de raio igual a 60 cm [15], mas o número de células da matriz que discretiza este meio era limitado pelo método usado na simulação e pela quantidade de memória disponível. Este fato impediu que os núcleos alcançassem uma qualidade melhor. O programa XYZP adaptado para esta finalidade praticamente chegou ao seu limite, portanto no aprimoramento desta pesquisa deveremos usar algum programa que contorne este problema usando, por exemplo, coordenadas cilíndricas ou esféricas, aproveitando as simetrias do problema [15].

O cerne matemático do programa de cálculo da dose de radiação tem um desempenho comparável aos comerciais, tanto na precisão dos cálculos, quanto no tempo de cálculo. Para se calcular a matriz 3D da distribuição da dose para todo um meio material de $32 \times 32 \times 32 \text{ cm}^3$ o tempo gasto é de aproximadamente 3 minutos em um equipamento do tipo PC de 400MHz. No entanto, ainda há muito a ser otimizado no programa responsável pela convolução, o que pode aumentar ainda mais a sua eficiência.

Na parte computacional, o próximo passo será a construção, por profissionais da área da informática, de uma interface gráfica e um módulo que permita ler arquivos de dados provenientes de sistemas de tomografias computadorizadas e ressonância magnética, que são as fontes de informação 3D da geometria do paciente e do tumor.

Concluimos portanto, que o método descrito nesta tese para a obtenção da distribuição espacial da dose absorvida usando convoluções é bastante preciso e viável de ser implantado no planejamento de procedimentos de teleterapia.

Apêndice A

Algumas definições usadas nesta tese

Apresentamos aqui as definições formais das grandezas físicas usadas nesta tese dadas pela ICRU (*International Commission on Radiation Units and Measurements*) [23]. As unidades destas grandezas são expressas de acordo com o Sistema Internacional de unidades (SI).

Na segunda seção deste apêndice definimos a maneira pela qual avaliamos o erro entre os valores calculados e aqueles usados como referência.

A.1 As definições dadas pelo ICRU

A.1.1 Radiometria

A fluência de partículas, Φ , é o quociente de dN por da , onde dN é o número de partículas incidente em uma esfera de área da .

$$\Phi = \frac{dN}{da}.$$

Unidade: m^{-2} .

A.1.2 Coeficientes de interação

A seção de choque, σ , de um alvo para uma interação produzida por uma partícula carregada ou não, é o quociente de P por Φ , onde P é a probabilidade de interação por partícula alvo quando sujeita a uma fluência de partículas Φ .

$$\sigma = \frac{P}{\Phi}. \tag{A.1}$$

Unidade: m^2 .

Coefficiente de atenuação em massa, μ/ρ , de um material para partículas ionizantes sem carga elétrica é o quociente de dN/N por $\rho d\ell$, onde dN/N é a fração de partículas que interagem após atravessarem uma distância $d\ell$ em um material de densidade ρ .

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{1}{\rho N} \frac{dN}{d\ell}. \quad (\text{A.2})$$

Unidade: $\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$

Nota: μ , definido implicitamente, é o coeficiente de atenuação linear total.

Coefficiente de transferência de energia em massa, μ_{tr}/ρ , de um material para partículas ionizantes sem carga elétrica é dado pelo quociente de dE_{tr}/EN por $\rho d\ell$, onde E é a energia de cada partícula (excluindo a sua energia de repouso), N é o número de partículas, e dE_{tr}/EN é a fração da energia da partícula incidente que é transferida para a energia cinética de partículas carregadas pelas interações ao ser atravessada uma distância $d\ell$ em um material de densidade ρ .

$$\frac{\mu_{tr}}{\rho} = \frac{1}{\rho EN} \frac{dE_{tr}}{d\ell}. \quad (\text{A.3})$$

Unidade: $\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$.

Coefficiente de absorção de energia em massa, μ_{en}/ρ , de um material para partículas ionizantes sem carga elétrica é o produto do coeficiente de transferência de energia em massa, μ_{tr}/ρ , por $(1 - g)$, onde g é a fração da energia das partículas carregadas secundárias que é perdida por bremsstrahlung no material.

$$\frac{\mu_{en}}{\rho} = \frac{\mu_{tr}}{\rho} (1 - g). \quad (\text{A.4})$$

Unidade: $\text{m}^2 \text{kg}^{-1}$.

Stopping power total em massa, S/ρ , de um material para partículas carregadas é o quociente de dE por $\rho d\ell$, onde dE é a energia perdida por uma partícula carregada ao atravessar uma distância $d\ell$ em um material de densidade ρ .

$$\frac{S}{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{d\ell}. \quad (\text{A.5})$$

Unidade: $\text{J m}^2 \text{ kg}^{-1}$.

Nota: Definido implicitamente está o *stopping power* linear total, S .

A.1.3 Dosimetria

Energia cedida, ϵ , pela radiação ionizante para a matéria em um volume é:

$$\epsilon = R_{in} - R_{out} + \sum Q \quad (\text{A.6})$$

onde

- R_{in} é a energia radiante incidente no volume, isto é, a soma das energias cinéticas de todas as partículas ionizantes carregadas e neutras que entram no volume.
- R_{out} é a energia radiante que sai do volume, isto é, a soma das energias cinéticas de todas as partículas ionizantes carregadas e neutras que deixam o volume.
- $\sum Q$ é a soma de todas as mudanças na energia de repouso dos núcleos e partículas elementares em qualquer transformação nuclear que ocorra no volume.

Unidade: J.

Nota: ϵ é uma quantidade estocástica, mas seu valor esperado, designado energia média cedida, $\bar{\epsilon}$, é uma quantidade não-estocástica.

A dose absorvida, D , é o quociente de $d\bar{\epsilon}$ por dm , onde $d\bar{\epsilon}$ é a energia média cedida pela radiação ionizante para uma quantidade de matéria de massa dm .

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm}. \quad (\text{A.7})$$

Unidade: J kg^{-1} .

Nota: O nome especial para a unidade de dose absorvida é o gray (Gy), equivalente a um joule por quilograma.

O **kerma**, K , é o quociente de dE_{tr} por dm , onde dE_{tr} é a soma das energias cinéticas iniciais de todas as partículas ionizantes carregadas liberadas pelas partículas ionizantes neutras em um material de massa dm .

$$k = \frac{dE_{tr}}{dm}. \quad (\text{A.8})$$

Unidade: J kg^{-1} .

Nota: O gray (Gy) também é usado como unidade para o kerma da mesma forma que para a dose.

A.2 Erro relativo e absoluto

Durante os estudos dos artigos sobre os algoritmos de cálculo da dose de radiação notamos o emprego freqüente de um tipo de avaliação de erro entre os dados do modelo apresentado com os valores medidos ou simulados, que servem de referência. No entanto este tipo de avaliação de erro é pouco prático para o físico médico no seu dia-a-dia. Nesta tese utilizamos um outro tipo de avaliação do erro, o erro relativo. Em contrapartida, chamaremos de erro absoluto a forma de avaliação do erro comumente usada nos artigos científicos.

Definimos o erro relativo, ε_r , no ponto \vec{r}_i^λ como sendo o quociente entre o módulo da diferença entre o valor de referência, D_m , e o calculado, D_c , pelo valor de referência, todos dados no mesmo ponto de interesse, \vec{r}_i^λ .

$$\varepsilon_r(\vec{r}_i^\lambda) = \frac{|D_c(\vec{r}_i^\lambda) - D_m(\vec{r}_i^\lambda)|}{D_m(\vec{r}_i^\lambda)} \times 100\% \quad (\text{A.9})$$

Definimos o erro absoluto, ε_a , no ponto \vec{r}_i^λ como o quociente entre o módulo da diferença entre os valores referência e calculado, e o valor de pico do conjunto de dados de referência, D_{pico} .

$$\varepsilon_a(\vec{r}_i^\lambda) = \frac{|D_c(\vec{r}_i^\lambda) - D_m(\vec{r}_i^\lambda)|}{D_{pico}} \times 100\% \quad (\text{A.10})$$

O valor de referência pode ser o resultado experimental ou o simulado.

Note que o erro absoluto é proporcional à diferença entre o valor de referência e o calculado, já o erro relativo depende da razão entre esta diferença e o valor de referência. Tipicamente o erro relativo é maior que o erro absoluto como mostrado no capítulo 5. Desta forma, o erro em um determinado ponto é interpretado como a tolerância percentual entre o valor real e o calculado naquele ponto.

Apêndice B

Tabela de probabilidades de interações do fóton na água

Encontramos na tabela a seguir a proporção entre os tipos de interações na água para várias energias de fótons e as respectivas proporções para a transferência de energia em cada processo. Os valores que apresentamos provêm da referência [1].

$h\nu$ (keV)	% de interações por cada processo				% de energia transferida por cada processo			% da energia perdida por bremsstrahlung
	Rayl.	Comp.	Foto.	Pares	Comp.	Foto.	Pares	
10,0	4,5	3,1	92,4	0,0	0,1	99,9	0,0	0,0
15,0	8,5	10,8	80,7	0,0	0,4	99,6	0,0	0,0
20,0	11,6	23,3	65,1	0,0	1,3	98,7	0,0	0,0
30,0	13,0	50,7	36,3	0,0	6,8	93,2	0,0	0,0
40,0	11,0	69,6	19,4	0,0	19,3	80,7	0,0	0,0
50,0	8,6	80,4	11,0	0,0	37,2	62,8	0,0	0,0
60,0	6,8	86,6	6,6	0,0	55,0	45,0	0,0	0,0
80,0	4,5	92,6	2,9	0,0	78,8	21,2	0,0	0,0
100,0	3,1	95,3	1,5	0,0	89,6	10,4	0,0	0,0
150,0	1,6	97,9	0,5	0,0	97,4	2,6	0,0	0,0
200,0	1,0	98,8	0,2	0,0	99,0	1,0	0,0	0,0
300,0	0,5	99,4	0,1	0,0	99,7	0,3	0,0	0,1
400,0	0,4	99,6	0,0	0,0	99,9	0,1	0,0	0,1
500,0	0,3	99,7	0,0	0,0	99,9	0,1	0,0	0,1
600,0	0,2	99,8	0,0	0,0	100,0	0,0	0,0	0,1
800,0	0,1	99,9	0,0	0,0	100,0	0,0	0,0	0,2
(MeV)								
1,0	0,1	99,9	0,0	0,0	100,0	0,0	0,0	0,2
1,5	0,0	99,8	0,0	0,2	99,9	0,0	0,1	0,4
2,0	0,0	99,2	0,0	0,8	99,3	0,0	0,7	0,5
3,0	0,0	97,1	0,0	2,9	96,7	0,0	3,3	0,8
4,0	0,0	94,5	0,0	5,5	93,3	0,0	6,7	1,1
5,0	0,0	91,6	0,0	8,4	89,6	0,0	10,4	1,4
6,0	0,0	88,9	0,0	11,1	86,2	0,0	13,8	1,6
8,0	0,0	83,1	0,0	16,9	79,0	0,0	21,0	2,3
10,0	0,0	77,0	0,0	23,0	71,9	0,0	28,1	2,9
15,0	0,0	65,6	0,0	34,4	59,3	0,0	40,7	4,6
20,0	0,0	56,0	0,0	44,0	49,3	0,0	50,7	6,5
30,0	0,0	43,2	0,0	56,8	37,1	0,0	62,9	10,0
40,0	0,0	35,1	0,0	64,9	29,7	0,0	70,3	13,6
50,0	0,0	29,3	0,0	70,7	24,6	0,0	75,4	16,8
60,0	0,0	25,3	0,0	74,7	21,1	0,0	78,9	19,8
80,0	0,0	19,7	0,0	80,3	16,4	0,0	83,6	25,3
100,0	0,0	16,0	0,0	84,0	13,3	0,0	86,7	30,1

Apêndice C

Os testes e o código fonte do programa que realiza os cálculos 3D da dose

Neste apêndice apresentamos os testes e a implementação computacional da função de convolução 3D dada pela equação 4.1, aplicando as técnicas discutidas no capítulo 4. Apresentamos também o código fonte dos programas usados nos cálculos da distribuição 3D da dose mostrados no capítulo 5.

C.1 A estrutura do programa de convolução

Os módulos do programa de cálculo tridimensional da dose estão organizados conforme o esquema mostrado na figura C.1.

O usuário do programa deve fornecer como informação de entrada a matriz de densidades $[\rho]$ e um núcleo de deposição de energia $[k_i]$ (o índice i significa primário, secundário ou múltiplo espalhamento). Um programa chamado **fluência** calcula a matriz da fluência primária $[\Phi_p]$ a partir da matriz de densidades, conforme discutido na seção 4.2. O programa **dose** calcula a matriz de dose parcial $[D_i]$ por meio da convolução via FFT como apresentado nas seções 4.2 e 4.3.2.

Este procedimento é feito para cada núcleo de deposição de energia a fim de obter as doses parciais. Por fim, um programa bastante simples, não mostrado no esquema C.1, é usado para somar estas doses parciais e fornecer a dose total, o programa **soma**.

Todos os programas foram escritos em linguagem C++ da GNU. Escolhemos esta lin-

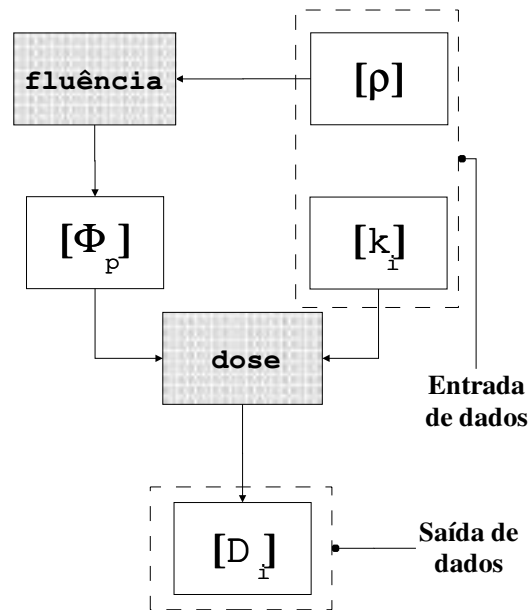


Figura C.1: Esquema da organização do programa de cálculo tridimensional da dose. O sinal [] significa matriz de dados no formato apresentado no apêndice F.

guagem por ela possuir todas as características de programação estruturada do ANSI C [24] e ao mesmo tempo dispor de comandos orientados a objeto, que facilita muito a programação. O C++ da GNU é muito conhecido pois seu compilador e as bibliotecas associadas são todas gratuitas e de domínio público. Este fato torna os compiladores da GNU disponíveis para qualquer sistema operacional existente no mercado.

C.1.1 O código fonte

Como apresentado na seção anterior, o programa de cálculo da dose é composto basicamente por três blocos que tratam da fluência, convolução e soma das doses parciais. Este três blocos são unidos em um *shell-script* [25] para a TCshell^a. Por questão de espaço não discutiremos os detalhes do código fonte e comentaremos apenas os termos gerais.

Implementamos a fluência primária dada pela equação 4.4 multiplicada pela matriz densidade no programa **fluência**. Este programa é executado com o arquivo de densidades em sua linha de comando e pede ao usuário as seguintes informações: a distância da fonte à superfície (SSD), o tamanho do campo na superfície do meio e se desejamos o campo com ou sem divergência geométrica.

^aTCshell é um tipo de terminal Linux/Unix que pode ser programado facilmente.

Com o arquivo de dados de fluência e os núcleos de deposição de energia armazenados em arquivos no formato padrão, executamos o programa `dose` para cada uma das doses parciais a serem calculadas. Este programa faz a convolução entre os dois conjuntos de dados que são informados na sua linha de comando. Como já comentamos, a convolução é obtida por meio de FFT, que é feita por uma biblioteca específica de alto desempenho chamada FFTW [26].

A biblioteca FFTW possui vários tipos de algoritmos de FFT implementados em seu código [26]. Ela seleciona o mais adequado a cada situação, permitindo ao usuário trabalhar com qualquer número de amostragem, não necessariamente do tipo $N = 2^\gamma$ com γ sendo um número inteiro positivo^b e mantendo a mesma precisão, embora o tempo de cálculo possa ser um pouco maior.

Com as doses parciais calculadas executamos o programa `doset` para somá-las e obtermos a dose total.

O programa fluência

Linha de compilação

```
g++ -o fluencia fluencia3.C fluencia.C -O4
```

Os arquivos fonte

fluencia3.C

```
#include <iostream.h>
#include <fstream.h>

#include "fluencia.H"

#define NMaxCell 64
#define ZMaxCell 64

void main (int argc, char *argv[])
{
```

^bComo o exigido pelo algoritmo original de Cooley-Tukey [20].

```

int i,j,k, nx,ny,nz, campo_x,campo_y;
double phi, escalap, escalas, r0;
char diverg;
double Ro[NMaxCell][NMaxCell][ZMaxCell],
    Phi[NMaxCell][NMaxCell][ZMaxCell];

if (argc < 5) {
    cout << "Uso: " ;
    cout << argv[0] ;
    cout << " densidade_p.dat densidade_s.dat fluencia_p.dat";
    cout << " fluencia_s.dat [fluencia_c.dat]";
    cout << endl;
    return 0;
}

cout << "Tamanho do campo (em # de células) na direção X= " ;
cin >> campo_x;
cout << "Tamanho do campo (em # de células) na direção Y= " ;
cin >> campo_y;
cout << "Deseja campo divergente (d) ou paralelo (p)? ";
cin >> diverg;
cout << "Qual a distância da fonte a superfície (SSD)? ";
cin >> r0;
cout << "A escala da fluencia primária para cada voxel cúbico (cm):" ;
cin >> escalap;
cout << "A escala da fluencia secundária para cada voxel cúbico (cm):" ;
cin >> escalas;
cout << "As dimensões máxima da matriz atual é de ";
cout << NMaxCell << " X " << NMaxCell << " X " << ZMaxCell << endl;

// Ler o arquivo passado como primeiro parâmetro
ifstream leitura (argv[1]);
leitura >> nx >> ny >> nz;
for (i=0; i<nx; i++)
    for (j=0; j<ny; j++)

```

```

        for(k=0; k<nz; k++)
leitura >> Ro[i][j][k];
leitura.close();

// A fluencia primária
Fluencia (nx,ny,nz, campo_x,campo_y, escalap, r0, diverg, Ro, Phi);
ofstream saidap (argv[3]);
saidap << nx << " " << ny << " " << nz << endl << endl;
for (i=0; i<nx; i++){
    for (j=0; j<ny; j++){
        for (k=0; k<nz; k++)
saidap << Phi[i][j][k] << " ";
        saidap << endl;
    }
    saidap << endl;
}
saidap.close ();

// Ler o arquivo passado como segundo parâmetro
ifstream leitura2 (argv[2]);
leitura2 >> nx >> ny >> nz;
for (i=0; i<nx; i++)
    for (j=0; j<ny; j++)
        for(k=0; k<nz; k++)
leitura2 >> Ro[i][j][k];
leitura2.close();

// A fluencia secundária e de múltiplo espalhamento
Fluencia (nx,ny,nz, campo_x,campo_y, escalas, r0, diverg, Ro, Phi);
ofstream saidas (argv[4]);
saidas << nx << " " << ny << " " << nz << endl << endl;
for (i=0; i<nx; i++){
    for (j=0; j<ny; j++){
        for (k=0; k<nz; k++)
saidas << (Phi[i][j][k]*Ro[i][j][k]) << " ";

```

```

        saidas << endl;
    }
    saidas << endl;
}
saidas.close ();

// A fluencia para os núcleos de correção
if (argc>4){
    ofstream saidac (argv[5]);
    saidac << nx << " " << ny << " " << nz << endl << endl;
    for (i=0; i<nx; i++){
        for (j=0; j<ny; j++){
            for (k=0; k<nz; k++){
                saidac << (Phi[i][j][k]*Ro[i][j][k]*(1-Ro[i][j][k])) << " ";
            }
        }
        saidac << endl;
    }
    saidac.close ();
}
}

```

fluencia.H

```

#include <iostream.h>
#include <math.h>
#define NMaxCell 64
#define ZMaxCell 64

#ifndef FLUENCIA_H
#define FLUENCIA_H

void Fluencia (int ,int ,int ,int ,int ,double , double , char ,
               double [][][ZMaxCell], double [][][ZMaxCell]);

#endif

```

fluencia.C

```
#include <iostream.h>
#include <math.h>

#define NMaxCell 64
#define ZMaxCell 64

#define phi0 1
#define mi_ro 0.0632

inline double Prod_exp (int ,int ,int ,double ,double [] [NMaxCell] [ZMaxCell]);
inline double Campo (int , int , char ,double , double );

void Fluencia (int nx, int ny, int nz, int campo_x, int campo_y,
               double escala,double r0, char Div,
               double ro [] [NMaxCell] [ZMaxCell],
               double phi [] [NMaxCell] [ZMaxCell]){

    int i,j,k;
    double r, x,y,z, campox, campoy;

    x = i*escala;
    y = j*escala;
    z = k*escala;

    r = sqrt(x*x + y*y + z*z);

    for (i=0; i<nx; i++)
        for (j=0; j<ny; j++)
            for (k=0; k<nz; k++){
if(i>=((nx-Campo(k,campo_x, Div, escala, r0))/2) &
    i<=((nx+Campo(k,campo_x, Div, escala, r0))/2) &
    j>=((ny-Campo(k,campo_y, Div, escala, r0))/2) &
```

```

        j<=((ny+Campo(k,campo_y, Div, escala, r0))/2)){
    phi[i][j][k] = phi0*(r0*r0 / ((k*escala+r0)*(k*escala+r0)))
        *Prod_exp(i,j,k, escala, ro);
    }
else {phi[i][j][k] = 0.0;}
    }
}

```

```

inline double Prod_exp (int i,int j,int k, double escala,
double ro[][NMaxCell][ZMaxCell]){

```

```

    int z;
    double produtorio;

    produtorio = 1.0;

    for (z=0; z<=k; z++)
        produtorio *= exp (-ro[i][j][z] * mi_ro * escala);
    return produtorio;
}

```

```

inline double Campo (int k, int campo, char divergencia,
    double escala, double ssd){

```

```

    double ext_campo;

    switch (divergencia){
    case 'd':
        ext_campo = (k*escala +ssd) * (campo/ssd);
        break;
    case 'p':
        ext_campo = campo;
        break;
    }
    return ext_campo;
}

```

```
}
```

O programa dose

Linha de compilação

```
g++ -o dose dose_c.C convolucao_c.C -O4
```

Os arquivos fonte

```
dose_c.C

#include <iostream.h>
#include <fstream.h>
#include <fftw.h>

#include "convolucao_c.H"
#include "../acessorios/deslocar.H"

#define NMaxCell 128
#define ZMaxCell 128

void main (int argc, char *argv[])
{
    fftw_complex Phi [NMaxCell] [NMaxCell] [ZMaxCell],
        Kernel [NMaxCell] [NMaxCell] [ZMaxCell];
    fftw_complex dosep [NMaxCell] [NMaxCell] [ZMaxCell];

    int i,j,k, nx,ny,nz, nxc,nyc,nzc;
    unsigned foi;
    double Dose;

    if (argc < 4)
    {
        cout << "Uso: " << argv[0] << " fluencia.dat kernel.kernel";
        cout << " saida.dat kernel.id" << endl;
        return 0;
    }
}
```



```

    }

// Limpando a área de matrizes
for (i=0; i<NMaxCell; i++)
    for (j=0; j<NMaxCell; j++)
        for (k=0; k<ZMaxCell; k++){
Phi [i][j][k].im=0;
Phi [i][j][k].re=0;
Kernel [i][j][k].im=0;
Kernel [i][j][k].re=0;
    }

// Ler o arquivo passado como primeiro parâmetro
ifstream leitura (argv[1]);
leitura >> nx >> ny >> nz;
for (i=0; i<nx; i++)
    for (j=0; j<ny; j++)
        for(k=0; k<nz; k++)
leitura >> Phi[i][j][k].re;
leitura.close();

// Lendo arquivo passado como segundo parâmetro
ifstream leitura2 (argv[2]);
leitura2 >> nxc >> nyc >> nzc;
for (i=0; i<nxc; i++)
    for (j=0; j<nyc; j++)
        for (k=0; k<nzc; k++)
leitura2 >> Kernel[i][j][k].re;
leitura2.close();

// Chamando a função de convolução
foi = convolucao (nx,ny,nz, Phi, Kernel, dosep);
if (foi)
{
    cout << "Modulo de convolucao acessado." << endl;
}

```

```

    }

    // gravando o arquivo com a dose
    Deslocar (dosep, argv[4], argv[3]);
}

convolucao_c.H

#include <iostream.h>
#include <fstream.h>
#include <fftw.h>

#include "convolucao_c.H"
#include "../acessorios/deslocar.H"

#define NMaxCell 128
#define ZMaxCell 128

void main (int argc, char *argv[])
{
    fftw_complex Phi[NMaxCell][NMaxCell][ZMaxCell],
        Kernel[NMaxCell][NMaxCell][ZMaxCell];
    fftw_complex dosep[NMaxCell][NMaxCell][ZMaxCell];

    int i,j,k, nx,ny,nz, nxc,nyc,nzc;
    unsigned foi;
    double Dose;

    if (argc < 4)
    {
        cout << "Uso: " << argv[0] << " fluencia.dat kernel.kernel";
        cout << " saida.dat kernel.id" << endl;
        return 0;
    }
}

```

```

// Limpando a área de matrizes
for (i=0; i<NMaxCell; i++)
    for (j=0; j<NMaxCell; j++)
        for (k=0; k<ZMaxCell; k++){
Phi [i][j][k].im=0;
Phi [i][j][k].re=0;
Kernel [i][j][k].im=0;
Kernel [i][j][k].re=0;
    }

// Ler o arquivo passado como primeiro parâmetro
ifstream leitura (argv[1]);
leitura >> nx >> ny >> nz;
for (i=0; i<nx; i++)
    for (j=0; j<ny; j++)
        for(k=0; k<nz; k++)
leitura >> Phi[i][j][k].re;
leitura.close();

// Lendo arquivo passado como segundo parâmetro
ifstream leitura2 (argv[2]);
leitura2 >> nxc >> nyc >> nzc;
for (i=0; i<nxc; i++)
    for (j=0; j<nyc; j++)
        for (k=0; k<nzc; k++)
leitura2 >> Kernel[i][j][k].re;
leitura2.close();

// Chamando a função de convolução
foi = convolucao (nx,ny,nz, Phi, Kernel, dosep);
if (foi)
{
    cout << "Modulo de convolucao acessado." << endl;
}

```

```

// gravando o arquivo com a dose
Deslocar (dosep, argv[4], argv[3]);
}

```

convolucao_c.C

```

#include <iostream.h>
#include <fftw.h>
#define NMaxCell 128
#define ZMaxCell 128
#include <fstream.h>

unsigned convolucao(int x, int y, int z,
    fftw_complex phi_p[] [NMaxCell] [ZMaxCell],
    fftw_complex k_p[] [NMaxCell] [ZMaxCell],
    fftw_complex dose[] [NMaxCell] [ZMaxCell])
{

    // Variaveis da biblioteca FFTW
    fftw_complex *PHI, *K, DOSE[NMaxCell] [NMaxCell] [ZMaxCell];
    fftwnd_plan p, pinv;
    double scale = 1.0 / (NMaxCell * NMaxCell * ZMaxCell);

    // Variaveis internas do modulo de convolucao
    int i,j,k;

    // planos para ambas as transformadas
    p = fftw3d_create_plan (NMaxCell,NMaxCell,ZMaxCell,
        FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE | FFTW_IN_PLACE);
    pinv = fftw3d_create_plan (NMaxCell,NMaxCell,ZMaxCell,
        FFTW_BACKWARD, FFTW_ESTIMATE);

    // computando as FFT's

```

```

fftwnd_one(p, &phi_p[0][0][0], NULL);
fftwnd_one(p, &k_p[0][0][0], NULL);

for (i=0; i<NMaxCell; ++i)
  for (j=0; j<NMaxCell; ++j)
    for (k=0; k<NMaxCell; ++k)
{
DOSE[i][j][k].re=(phi_p[i][j][k].re*k_p[i][j][k].re
- phi_p[i][j][k].im*k_p[i][j][k].im)*scale;
DOSE[i][j][k].im=(phi_p[i][j][k].re*k_p[i][j][k].im
+ phi_p[i][j][k].im*k_p[i][j][k].re)*scale;
}

// transformada inversa para encontrar 'dose'
// que e' a convolucao de 'phi' com 'k'
fftwnd_one (pinv, &DOSE[0][0][0], &dose[0][0][0]);

// destruindo os planejamentos das transformadas
fftwnd_destroy_plan(p);
fftwnd_destroy_plan(pinv);

return 1;
}

```

O programa soma

Linha de compilação

```
g++ -o doset doset.C -O4
```

O arquivo fonte

```

doset.C

#include <iostream.h>
#include <fstream.h>

```

```

void main (int argc, char *argv[])
{

    int i,j,k, x, nx,ny,nz;
    double dosep, doses, dosem, doses_c, dosem_c, doset;

    if (argc < 4) {
        cout << "Uso:" << endl;
        cout << argv[0];
        cout << " dose_primaria.dose dose_sec.dose ";
        cout << "dose_mul.dose [doses_c.dose dosem_c.dose]" << endl;
        return 0;}

    ifstream entrada1 (argv[1]);
    entrada1 >> nx >> ny >> nz;

    ifstream entrada2 (argv[2]);
    entrada2 >> nx >> ny >> nz;

    ifstream entrada3 (argv[3]);
    entrada3 >> nx >> ny >> nz;

    ifstream entrada4 (argv[4]);
    entrada4 >> nx >> ny >> nz;

    ifstream entrada5 (argv[5]);
    entrada5 >> nx >> ny >> nz;

    ofstream saida ("doset.dose");
    saida << nx << " " << ny << " " << nz << endl << endl;

    dosep=0.0; doses=0.0; dosem=0.0;
    doses_c=0.0; dosem_c=0.0; doset=0.0;

    for (i=0; i<nx; i++){

```

```

        for (j=0; j<ny; j++){
            for(k=0; k<nz; k++){
entrada1 >> dosep;
entrada2 >> doses;
entrada3 >> dosem;
if (argc > 4){entrada4 >> doses_c;}
if (argc > 5){entrada5 >> dosem_c;}
doset = dosep + doses + dosem + doses_c +dosem_c;
saida << doset << " ";
        }
        saida << endl;
    }
    saida << endl << endl;
}

entrada1.close();
entrada2.close();
entrada3.close();
saida.close();

if (argc > 4){entrada4.close();}
if (argc > 5){entrada5.close();}
}

```

C.2 Os Testes da Função de Convolução

Fizemos os testes para averiguar se o programa de convolução 3D estava funcionando corretamente. Usamos funções unidimensionais e bidimensionais de [20] e comparamos com as respectivas convoluções apresentadas nesta mesma referência. Criamos uma função tridimensional também para esta finalidade, e o resultado desta convolução via FFT foi confrontado com o resultado de um programa que fazia uma convolução discreta, sem usar nenhum algoritmo de FFT, apenas convertendo as integrais em somatórios.

Todos os arquivos de dados usados nos testes seguem a convenção apresentada no apêndice F.

C.2.1 Teste 1D

O teste 1D consistiu na convolução de uma função pulso unidimensional com ele próprio, $h = f \star f$. Este pulso é definido pela expressão dada a seguir:

$$f(0, 0, z_i) = \begin{cases} 2 & \text{se } 0 \leq z_i < 7 \\ 0 & \text{se } z_i \geq 7 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

$$f(x_i, y_i, z_i) = 0 \text{ se } x_i > 0 \text{ ou } y_i > 0 \quad (\text{C.2})$$

Uma fatia da matriz montada para o cálculo é dada abaixo:

$$f(0, y_i, z_i) = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & \dots & 2 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & & & & & & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & & & & & \dots & 0 \end{bmatrix}_{16 \times 16} \quad (\text{C.3})$$

As outras fatias são nulas.

Na figura C.2 temos o gráfico encontrado para $h(0, 0, z_i)$, onde verificamos que o resultado está correto.

Foram feitos testes com este pulso sobre os três eixos das coordenadas e sobre as diagonais de três faces do cubo. Os resultados foram exatamente os mesmos. Para manter a uniformidade em todos os testes 1D, as matrizes usadas foram de $16 \times 16 \times 16$ células.

C.2.2 Teste 2D

Os dados usados neste teste são apresentados a seguir e também saíram da referência [20].

$$f(0, y_i, z_i) = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{4 \times 8} \quad (\text{C.4})$$

$$g(0, y_i, z_i) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{4 \times 8} \quad (\text{C.5})$$

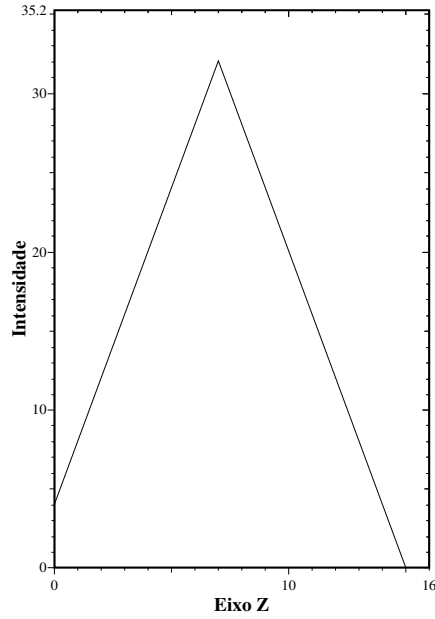


Figura C.2: Convolução da função apresentada anteriormente com ela própria.

$$f(x_i, y_i, z_i) = g(x_i, y_i, z_i) = 0 \text{ se } x_i > 0 \quad (\text{C.6})$$

As matrizes 3D usadas tinham dimensão de $4 \times 4 \times 8$.

O resultado obtido é mostrado a seguir:

$$h(0, y_i, z_i) = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 5 & 7 & 10 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 5 & 10 & 9 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{4 \times 8} \quad (\text{C.7})$$

As outras fatias com $x_i > 0$ são todas nulas. Este resultado, de acordo com a referência citada acima e com o programa de convolução convencional, está correto.

Estes dados também foram inseridos em outras orientações e todos cálculos mostraram-se corretos.

C.2.3 Teste 3D

Aqui usamos uma curva gaussiana tridimensional para testar a capacidade da rotina de convolução. A expressão usada é a seguinte:

$$f(x, y, z) = e^{-\frac{(x-4)^2 + (y-4)^2 + (z-4)^2}{10}} \quad (\text{C.8})$$

Esta função foi discretizada para um espaço cúbico de $8 \times 8 \times 8$ células e organizada na forma padrão dos dados de entrada.

Fizemos a convolução de $f(x, y, z)$ com ela própria, isto é, $h = f \star f$. O espaço usado foi de $16 \times 16 \times 16$, já considerando o devido *padding* de zeros.

A convolução feita via FFT apresentou praticamente os mesmos resultados que a convolução numérica feita através de somatórios, isto é, sem usar FFT. Veja as figuras C.3 e C.4 onde apresentamos as curvas de nível de uma fatia do espaço 3D.

Aqui foi fixado o plano $x_i = 7$ e as curvas de nível representam o valor de $h(7, y_i, z_i)$.

O pico da curva gaussiana nos dois casos foi igual a 57,8133. As figuras C.5 e C.6 nos dão uma visão tridimensional dos mesmos dados apresentados nas figuras C.3 e C.4. Aqui o eixo das intensidades tem o mesmo significado das curvas de nível nos gráficos anteriores.

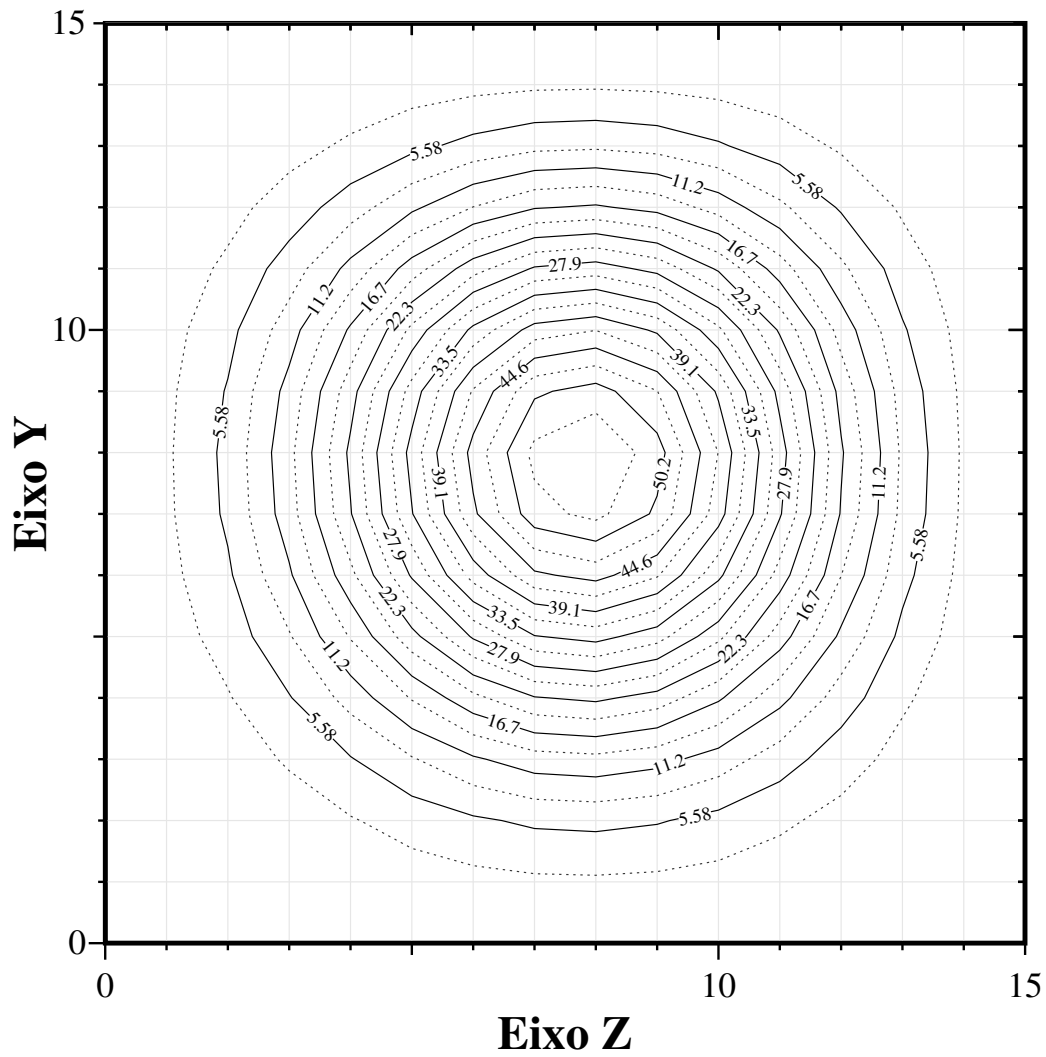


Figura C.3: Curvas de nível da convolução via FFT de uma gaussiana com ela própria.

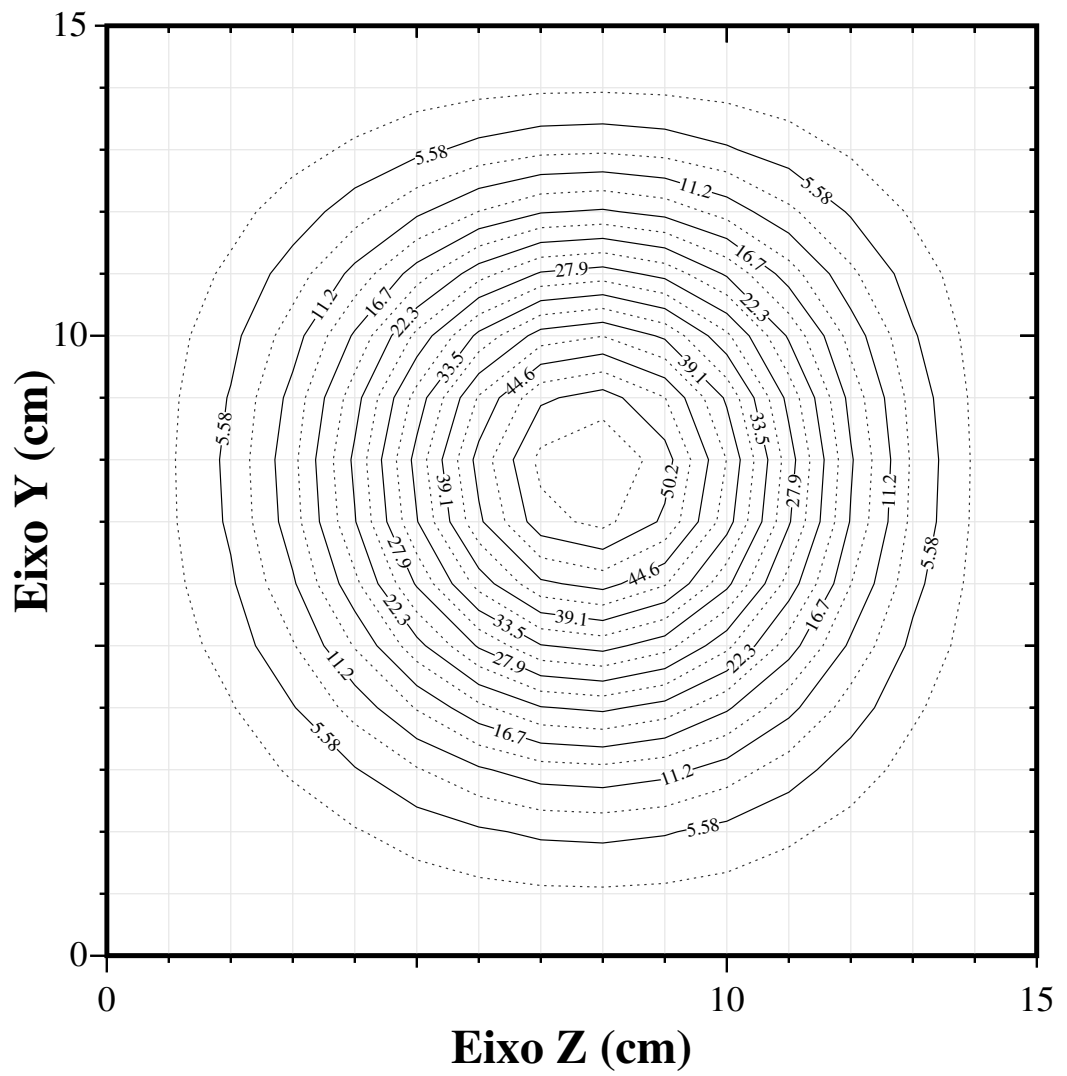


Figura C.4: A mesma operação é mostrada neste gráfico, porém via somatórios.

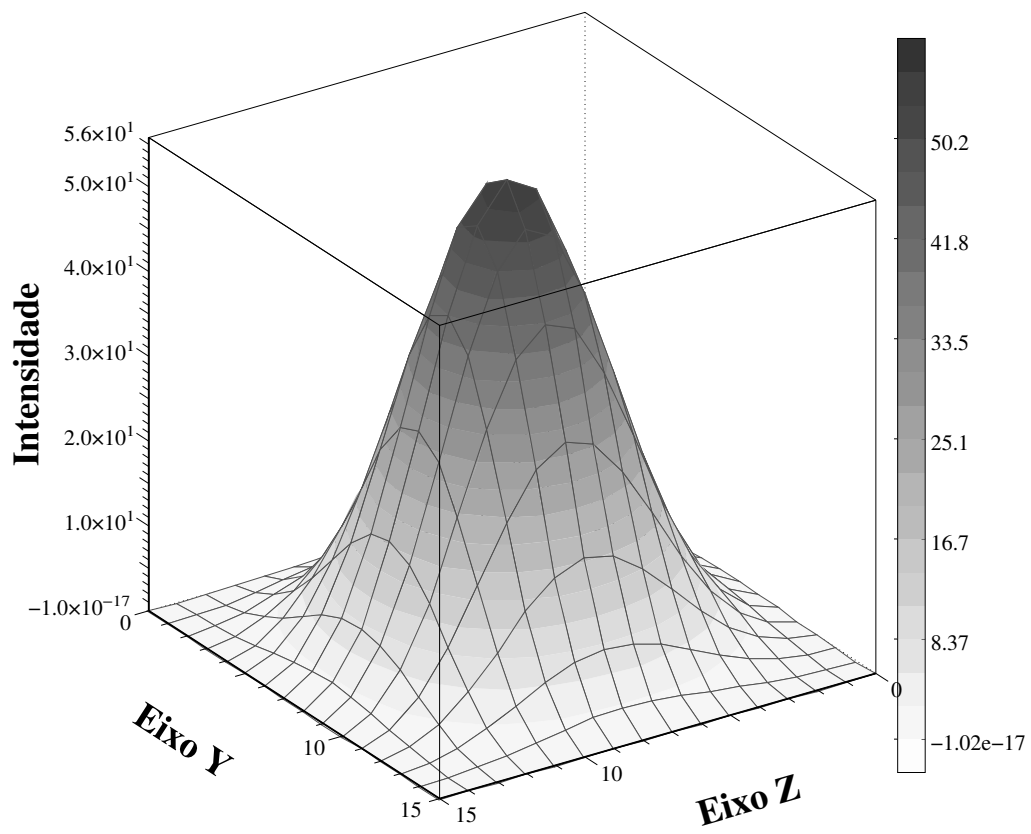


Figura C.5: Apresentação 3D da convolução via FFT.

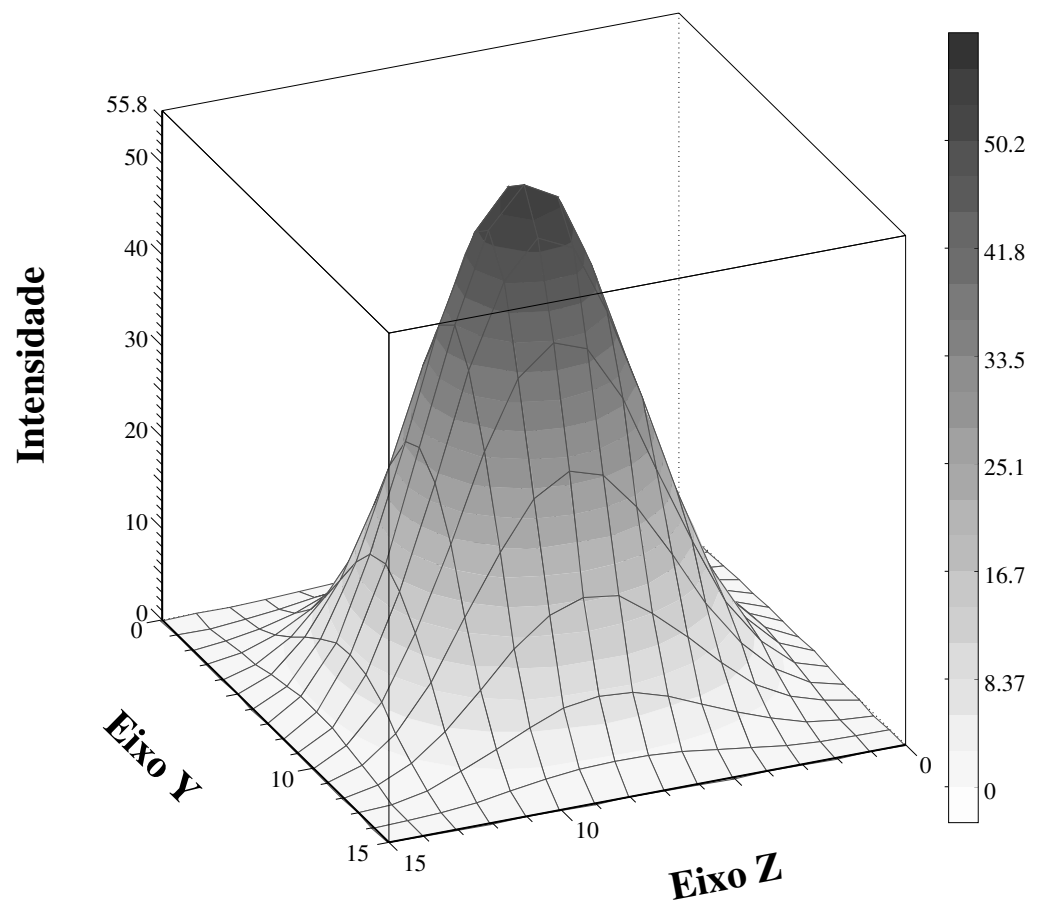


Figura C.6: Convolução convencional de duas gaussianas.

Apêndice D

Alterações no programa XYZP para a geração dos núcleos de convolução

Cada núcleo de convolução foi gerado por um programa diferente. Baseamos-nos em um programa contido no pacote do EGS4 chamado XYZP.

O programa XYZP, escrito em Mortran, utiliza as rotinas do EGS4 para simular a interação de um feixe de partículas em um meio material em coordenadas cartesianas [12]. Alteramos este programa com a finalidade de “forçar” a posição onde deve ocorrer a primeira interação dos fótons do feixe primário e contabilizar corretamente as partículas que depositarão as energias para os núcleos de convolução.

Primeiro vamos apresentar como fizemos com que o fóton incidente interagisse sempre no mesmo ponto. Na seqüência, apresentaremos a forma como controlamos o transporte das partículas nos núcleos primário, secundário e de múltiplo espalhamento.

D.1 “Forçando” a primeira interação do feixe

Desejamos interferir na simulação de maneira tal que todos os fótons do feixe tenham a sua primeira interação num ponto conhecido. A partir deste ponto, a cascata eletromagnética segue o seu caminho normal.

Uma das maneiras de forçar a interação de uma partícula é “viciar” o gerador de números aleatórios. Analisando o fluxograma do EGS4 descobrimos que a função SHOWER, que lança um fóton por vez contra o alvo, chama a subrotina PHOTON para determinar as interações e posições onde estas partículas irão interagir. Nesta subrotina o primeiro número sorteado é o ponto onde o fóton primário irá interagir, portanto basta chamar a rotina

SHOWER usando sempre a mesma semente para o gerador de números aleatórios. Porém deveremos restaurar a semente original antes que o gerador seja utilizado novamente, a fim de prevenir resultados viciados.

Analisando cuidadosamente o fluxograma da subrotina PHOTON descobrimos um desvio condicional para a rotina HOWFAR [12]. Esta rotina é escrita pelo usuário e será usada para retornar a semente original para a simulação. A condição para que haja o desvio da subrotina PHOTON para a HOWFAR é que entre a posição atual do fóton e a final deva haver pelo menos uma interface, quer seja entre células ou entre materiais diferentes.

Assim a alteração feita no programa ocorreu logo antes da chamada da rotina SHOWER:

...

```
ISEG=0; "Flag para dizer que houve uma interacao"  
ISEM=IXX; "Guardando a semente em ISEM"  
ICOND=1; "Flag para dizer que a semente IXX foi alterada"  
IXX=13; "Nova semente. De resultado previamente conhecido"  
IAUSFL(18)=1; "Flag para acionar o ausgab qdo ocorrer Compton"  
IAUSFL(16)=1; "Flag para acionar o ausgab qdo ocorrer Prod. Pares"  
IAUSFL(20)=1; "Flag para acionar o ausgab qdo ocorrer Int. Fotoel."  
  
CALL SHOWER (IQIN,ETOTIN,XIN,YIN,ZIN,UIN,VIN,WIN,IRIN,WTIN);
```

...

Criamos as variáveis ISEG, ISEM e ICOND para controlar a geração dos núcleos. ISEM armazena o valor da semente original e ICOND indica para a rotina HOWFAR que a semente atual é a “viciada”. IXX é a variável da semente do gerador de números aleatórios do EGS4. As outras variáveis serão apresentadas na seção seguinte pois tratam do controle das ordens de interação dos fótons. Na última linha é chamada a rotina SHOWER normalmente.

A rotina HOWFAR recebeu apenas um comando condicional para recuperar a semente original:

...

```
;IF (ICOND=1) [IXX=ISEM;  
                ICOND=0;  
                "OUTPUT IXX; ('IXXnew = ', I12);" "Depuração"  
                ] "Se a semente nao e' original, entao recupere-a"
```

...

Desta forma conseguimos fazer com que os fótons primários tenham a sua primeira interação controlada, bastando apenas modificar o ponto inicial do feixe para alterar a localização da primeira interação.

D.1.1 Os núcleos de deposição de energia

O núcleo primário deve ser composto pela energia depositada pelas partículas carregadas lançadas pela primeira interação dos fótons do feixe com a matéria. Para isso basta descartar os fótons após uma colisão Compton e os fótons gerados pelas partículas carregadas (bremsstrahlung e aniquilação de pares).

Este controle é feito pela variável ISEG e pelo vetor de sinalização IAUSFL () que aparecem na primeira listagem do código apresentada neste apêndice. ISEG indica que houve uma interação com o feixe de fótons. IAUSFL () é um conjunto de sinalizadores internos ao EGS4 que exige a chamada da rotina AUSGAB^a quando os eventos indicados entre parênteses por este sinalizador ocorrerem.

A rotina AUSGAB (IARG) é escrita pelo usuário e nela a energia depositada quando do transporte das partículas carregadas é armazenada em matrizes com esta finalidade. Usamos esta rotina para selecionar o armazenamento da energia somente das partículas carregadas primárias através de seu argumento IARG, que indica o processo pelo qual a rotina AUSGAB foi requisitada. Apenas foi necessária a inclusão de uma linha de comando nesta rotina:

```
IF (IARG=15 | IARG=17 | IARG=19) [ISEG=1;]
```

Esta condição muda o valor da variável ISEG de zero para um quando os argumentos da rotina AUSGAB indicarem produção de pares, Compton ou fotoelétrico, respectivamente. ISEG indicará à rotina HOWFAR, no instante em que for requisitada, que já ocorreu a primeira interação e que os fótons seguintes deverão ser descartados. Para tanto adicionamos a seguinte linha de comando na rotina HOWFAR:

```
IF (ISEG~0 & IQ(NP)=0) [IDISC=1;RETURN;]
```

Esta condição nos diz que a partícula indicada pelo índice NP é descartada (IDISC=1) se ela for fóton, IQ(NP)=0, e se ISEG for diferente de zero.

Os programas para a geração dos núcleos secundário e de múltiplo espalhamento seguem na mesma linha de trabalho porém necessitam de alterações mais elaboradas. Tais mudanças começam a depender muito de toda a estrutura complexa do programa XYZP e passam a não fazer sentido quando apresentadas em partes, por isso não as mostraremos nesta tese.

^aDo alemão *Ausgabe*, que significa saída; no nosso caso, refere-se à saída de dados da simulação.

Para geração do núcleo de deposição de energia secundário os elétrons primários não foram contabilizados, os fótons terciários não foram transportados, nem os fótons criados por bremsstrahlung e aniquilação de pares. Somente os elétrons secundários foram devidamente transportados e contabilizados.

Na geração do núcleo de múltiplo espalhamento os elétrons primários e secundários não foram computados e as interações dos fótons e elétrons que se sucederam à terceira colisão do fóton com a matéria seguiram sem nenhuma interferência, inclusive os fótons criados por bremsstrahlung.

Apêndice E

O PEGS

O PEGS é o pré-processador do EGS4 e dentre as suas várias atribuições, gera um arquivo com as seções de choque a serem utilizadas nas simulações [12].

Executamos o PEGS apenas uma única vez para ajustar os limites inferiores para o transporte de partículas carregadas e fótons, respectivamente AE e AP, discutidos na seção 3.3.1.2. Os valores usados estão na tabela 3.1. Este ajuste permite um melhor desempenho do EGS4 nas simulações.

O PEGS também permite selecionar o material a ser usado nas simulações, que no nosso caso foi H_2O , com densidade de $1g/cm^3$.

A entrada de dados para a execução do PEGS é mostrada a seguir:

```
COMP
  &INP NE=2,RHO=1.0,PZ=2,1 &END
H2O
H  O
ENER
  &INP AE=0.561,UE=30.511,AP=0.05,UP=30.    &END
PWLF
  &INP  &END
DECK
  &INP  &END
```

COMP significa que estamos selecionando o composto. Na segunda linha temos o número de elementos NE, a densidade do composto RHO e o número relativo PZ dos respectivos elementos mostrados na quarta linha. Na terceira linha está o nome do composto.

Abaixo da linha ENER estão as especificações de energias cinéticas das partículas dadas em MeV, onde UE é o limite superior de energia das partículas carregadas e analogamente

UP é o dos fótons.

PWLF diz para o PEGS usar a interpolação linear por partes (*piecewise linear fit*) para obter as seções de choque para a faixa de energia selecionada. Não requer mais informações de entrada.

DECK amostra os dados que serão armazenados no arquivo de saída. Também não requer maiores informações de entrada.

Apêndice F

O Formato Padrão dos Arquivos de Entrada e Saída

Os dados de entrada e saída foram gravados em arquivos texto. Este formato é muito importante pois podemos editar os arquivos de entrada com mais facilidade para criar ou modificar as heterogeneidades manualmente conforme as nossas necessidades. Os dados de saída seguem este mesmo padrão, permitindo também a fácil geração de gráficos.

Os arquivos de dados nos lembram uma matriz fatiada, como no exemplo na tabela F.1.

Na primeira linha estão as dimensões da matriz na forma (L, M, N) . L é o número de conjuntos separados por uma linha em branco, M é o número de linhas de cada conjunto e N é o número de colunas que cada conjunto possui. Em cada linha, os números são separados entre si por um espaço em branco e possuem no máximo oito dígitos de informação^a. Assim os tipos de dados possíveis são:

- inteiro com 8 dígitos: XXXXXXXX
- real com 8 casas decimais: 0.XXXXXXXXX
- real com 6 casas decimais e dois dígitos de expoente: 0.XXXXXXeXX

Fisicamente, as dimensões dos dados lidos se relacionam com a matriz espacial por $(L, M, N) \rightarrow (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, isto é, as coordenadas (L_1, M_1, N_1) são multiplicadas por uma fator de conversão, que no nosso caso corresponde a um lado das células em que o meio estudado foi discretizado. Assim, a posição do dado no arquivo e o respectivo índice da matriz na memória do computador identificam a sua posição física.

^aPadrão de escrita da linguagem ANSI C/C++

2 8 3

```
0.00822975 0.0165727 0.0273237
0.0165727 0.0333733 0.0550232
0.0273237 0.0550232 0.090718
0.0368832 0.0742736 0.122456
0.0407622 0.082085 0.135335
0.0368832 0.0742736 0.122456
0.0273237 0.0550232 0.090718
0.0165727 0.0333733 0.0550232
```

```
0.0165727 0.0333733 0.0550232
0.0333733 0.0672055 0.110803
0.0550232 0.110803 0.182684
0.0742736 0.149569 0.246597
0.082085 0.165299 0.272532
0.0742736 0.149569 0.246597
0.0550232 0.110803 0.182684
0.0333733 0.0672055 0.110803
```

Tabela F.1: Um exemplo de arquivo de dados.

Os espaços em branco entre os conjuntos e as quebras de linhas não são obrigatórias, mas tal artifício torna a leitura humana dos dados mais fácil.

Não há limites quanto à extensão da linha ou tamanho total do arquivo.

Apêndice G

As máquinas usadas nas simulações e cálculos numéricos

As características mais relevantes das máquinas usadas nesta tese estão na tabela abaixo.

Nome	Modelo/Freq.	RAM	Sistema Operacional	HD Interface
HAL9000	AMD k6-2/400MHz	88MB	GNU/Linux kernel 2.2.13-7mdk	IDE - UDMA 2
Thor	Alpha 4000/300MHz	1GB	OSF1	SCSI
Araguaia	Ultra Sparc 5/270MHz	128MB	SunOS 5.7	SCSI

Referências Bibliográficas

- [1] John Robert Cunningham and Harold Elfort Johns. *The Physics of Radiology*. Charles C. Thomas, 4th edition, 1984.
- [2] Frank H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. John Wiley and Sons, 1986.
- [3] Arthur Boyer and Ed Mok. A photon dose distribution model employing convolution calculations. *Medical Physics*, 12(2):169–177, Mar/Apr 1985.
- [4] Arthur L. Boyer and Edward C. Mok. Calculation of photon dose distributions in an inhomogeneous medium using convolutions. *Medical Physics*, 13(4):503–509, Jul/Aug 1986.
- [5] Nucletron International B.V. *PLATO - Radiotherapy Planning System*, 1995.
- [6] Yunping Zhu and Arthur Boyer. X-ray dose computations in heterogeneous media using 3-dimensional FFT convolution. *Physics in Medicine and Biology*, 35(3):351–368, 1990.
- [7] J. R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Addison-Wesley, 1975.
- [8] V. Kafarov. *Fundamentals of Mass Transfer*. Mir Publishers, 1975.
- [9] R. D. Evans. X-ray and gamma ray interactions. In E. Tochilin F. H. Attix, W. C. Roesch, editor, *Radiation dosimetry - Fundamentals*, volume I, chapter 3. Academic Press, 2nd edition, 1968.
- [10] T. R. Mackie. Applications of the Monte Carlo methods in radiotherapy. In *The Dosimetry of Ionizing Radiation*, volume III. K. R. Kase, B. E. Bjarngard, F. H. Attix, 1990.
- [11] J. W. Scrimger T. R. Mackie and J. J. Battista. A convolution method of calculating dose for 15-MV x rays. *Med. Phys.*, 12(2):188–196, Mar/Apr 1985.

- [12] Hideo Hirayama, Walter R. Nelson and David W. O. Rogers. *The EGS4 Code System*. Stanford Linear Accelerator Center, Stanford University, Stanford, California 94305, December 1985. SLAC-265.
- [13] D. W. O. Rogers and A. F. Bielajew. *Techniques of electron and photon transport*, volume III, chapter 5. K. R. Kase, B. E. Bjarngard, F. H. Attix, 1990.
- [14] *Proc. 8th Int. Conf. on Computers in Radiotherapy (Toronto)*, 1984.
- [15] T. R. Mackie and A. F. Bielajew. Generation of photon energy deposition kernels using EGS Monte Carlo code. *Physics in Medicine and Biology*, 33(1):1–20, 1988.
- [16] CRC - Handbook of Chemistry and Physics, 1989-1990.
- [17] D. W. O. Rogers A. F. Bielajew and A. E. Nahum. The Monte Carlo simulation of ion chamber response to cobalt - resolution of anomalies associated with interfaces. *Physics in Medicine and Biology*, (30):419–27, 1985.
- [18] CGR/GE Medical Systems. *Manual ALCYON Iii*, 1984.
- [19] Arthur L. Boyer. Shortening the calculation time of photon dose distributions in an inhomogeneous medium. *Medical Physics*, 11(4):552–554, Jul/Aug 1984.
- [20] E. Oran Brigham. *The Fast Fourier Transform and its Applications*. Signal Processing Series. Prentice Hall, 1988.
- [21] Eugene Butkov. *Fisica Matematica*. Guanabara Koogan, 1988.
- [22] *Numerical Recipes in Fortran 77: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [23] Radiation Quantities and Units. Technical Report 33, International Commision on Radiation Units and Measurement - ICRU, April 1980.
- [24] P. J. Plauger. *A biblioteca Standard C*. Campus, 1994.
- [25] Mark G. Sobell. *A Practical Guide to Linux*. Addison-Wesley, 1997.
- [26] M. Frigo and S. G. Johnson. *FFTW - Fastest Fourier Transform in the West (User's Manual)*. <http://www.fftw.org>.