

UNIVERSIDADE DE LISBOA

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Desenvolvimento de um pacote de geometria e aplicação ao cálculo de dose em braquiterapia

Ana Catarina Cardoso Farinha de Barros

MESTRADO EM FÍSICA
(ALTAS ENERGIAS E GRAVITAÇÃO)

2008

UNIVERSIDADE DE LISBOA

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Desenvolvimento de um pacote de geometria e aplicação ao cálculo de dose em braquiterapia

Ana Catarina Cardoso Farinha de Barros

Tese Orientada por:

Professor Doutor Luis Filipe dos Santos Garcia Peralta
Faculdade de Ciências da universidade de Lisboa

MESTRADO EM FÍSICA
(ALTAS ENERGIAS E GRAVITAÇÃO)

2008

Aos homens da minha vida
Nuno, João e Messias

“Há muitas coisas difíceis, mas nada é impossível!”

Agradecimentos

Em primeiro lugar, ao *Professor Luís Peralta* (“o Chefe”), pelo incentivo, pelas ideias e pela amizade.

Aos “*Power Rangers*”, que estiveram sempre ao meu lado, em especial ao que casou comigo e me apoia todos os dias.

À minha colega e amiga *Florabela Rego* que me tem ajudado, acompanhado e aconselhado muito ao longo da minha carreira académica.

Aos meus colegas de mestrado *Alberto Palma* e *Catarina Casteleiro* pelo apoio, amizade e companheirismo demonstrado durante todo o mestrado.

Aos professores do Departamento de Física da FCUL, nomeadamente a Professora *Amélia Maio* pelas opiniões e sugestões.

A todos os meus familiares por todo o incentivo e apoio que me têm prestado durante todo o meu percurso académico.

Ao Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas – LIP, como instituto de acolhimento, por ter disponibilizado todas as condições necessárias para a realização deste trabalho e elaboração da tese. Agradeço à Fundação para a Ciência e tecnologia o apoio financeiro através da concessão de uma bolsa de Iniciação à Investigação Científica, no âmbito dos projectos POI/FP/63448/2005 e 81924/2007.

E por último um agradecimento muito especial aos meus pais por todas as oportunidades que me têm proporcionado ao longo da vida.

Resumo

Neste trabalho é desenvolvido um pacote de geometria e histogramação (Ulysses) que é aplicado a um conhecido código de simulação de fótons de baixa energia (PENELOPE), de forma a tornar a utilização deste último mais simplificada para os utilizadores em aplicações médicas.

A radioterapia é actualmente um dos tratamentos mais comuns para tecidos cancerígenos, em que se pretende depositar uma dose de radiação prescrita num tumor, evitando danificar os tecidos normais à sua volta. Uma das aplicações de radioterapia em maior desenvolvimento actualmente é a braquiterapia.

A braquiterapia consiste na colocação de fontes radioactivas directamente no tumor (dentro do paciente) sendo uma das fontes mais usadas o I-125. Este método necessita de um modelo de distribuição de dose depositada muito detalhado, de forma a minimizar os danos colaterais em tecidos não cancerígenos.

As técnicas de simulação Monte Carlo (MC) têm sido aplicadas à braquiterapia para um número variado de cálculos, entre eles o cálculo de distribuição de dose absorvida em tecidos. Os métodos de simulação representam um elemento de grande importância neste método de tratamento, permitindo criar modelos de grande precisão.

O trabalho desenvolvido foi então usado no desenvolvimento de uma série de simulações de aplicação em braquiterapia, as quais já estão devidamente documentadas, sendo então efectuada uma comparação dos resultados de forma a avaliar a eficácia do novo método.

Palavras-chave: Radioterapia, braquiterapia, Monte Carlo, PENELOPE, Ulysses



Abstract

This work will discuss the development of a geometry and histogramming software package (Ulysses), which is integrated into the low energy photon simulation code (PENELOPE), simplifying its usage in medical the applications.

Radiotherapy is currently one of the most common treatments on cancer tissues, where the tumor is exposed to a specified dose of radiation aiming to damage the most of cancer tissue and the minimum of healthy cells. Amongst the radiotherapy applications, one that is currently undergoing a great development is brachytherapy.

Brachytherapy consists in deploying radioactive source directly in the middle of the tumorous tissue, being one of the most commons sources used the I-125. By requiring the deployment of a radioactive source inside a patient, this method requires a detailed knowledge of the distribution of deposited dose, in order to minimize the collateral damage in healthy tissue.

Monte Carlo simulation (MC) techniques have been widely used in brachytherapy applications, like the calculation of the distribution of absorbed dose in the tissues. This simulation method is a major importance to this kind of treatments, as it allows the generation of extremely detailed, and precise, models.

The work described in this document was applied in the development of a series of simulations of brachytherapy applications. These applications have been already extensively studied and documented, which allowed a comparison of the obtained results and a discussion of the efficiency of this new package.

Keywords: Radiotherapy, brachytherapy, Monte Carlo, PENELOPE, Ulysses

Índice

Resumo.....	1
Abstract.....	3
Lista de abreviações.....	7
1 Introdução.....	9
2 Dosimetria.....	13
2.1 Interações de fótons.....	13
2.1.1 Dispersão de Rayleigh.....	13
2.1.2 Efeito fotoelétrico.....	14
2.1.3 Efeito de Compton.....	15
2.1.4 Produção de pares e tripletos.....	17
2.1.5 Coeficiente de atenuação total.....	19
2.2 Interação de electrões.....	21
2.2.1 Colisão inelástica com electrões atómicos.....	21
2.2.2 Colisão inelástica de um electrão com o um núcleo.....	23
2.2.3 Dispersão elástica.....	25
2.2.4 Secções eficazes total para electrões.....	26
2.3 Poder de paragem dos electrões.....	27
2.4 Determinação da dose absorvida.....	32
2.4.1 Fluência.....	32
2.4.2 Fluência energética.....	33
2.4.3 Kerma.....	33
2.4.4 Dose absorvida.....	34
2.4.5 Equilíbrio de partículas carregadas.....	35
2.5 Medidas de determinação de dose.....	37
2.5.1 Teoria da cavidade de Bragg-Gray.....	37
2.5.2 Teoria da cavidade de Spencer-Attix.....	39
3 Simulação Monte Carlo.....	41
3.1 Introdução.....	41
3.1.1 História.....	41
3.1.2 Aplicações e áreas de aplicação.....	42
3.1.3 Monte Carlo e números aleatórios.....	43
3.1.4 Monte Carlo de transporte de radiação.....	43
3.2 PENELOPE.....	46
3.2.1 Introdução.....	46
3.2.2 Transporte de radiação.....	47
3.2.3 Estrutura.....	47
3.2.3.1 Rotação e translação.....	51
3.2.3.2 Superfícies quadráticas.....	54
3.2.3.3 Construção de uma geometria quadrática.....	56
4 Ulysses.....	59
4.1 Rotinas do utilizador.....	60
4.1.1 O programa main.....	60
4.1.2 Definição da geometria – ulgeo.....	62
4.1.3 Definição da fonte - ulsource.....	63
4.2 Biblioteca de rotinas de geometria - Ullib.....	63
4.2.1 Geometria.....	63

4.2.2 Mudança de coordenadas.....	68
4.2.3 Tracking e localização.....	69
4.3 Pacote de histogramação - Ulhistos.....	73
4.3.1 Histogramação básica.....	73
4.3.2 Estrutura do pacote.....	74
4.3.3 Início do pacote de histogramação e descrição de rotinas.....	75
5 Braquiterapia.....	77
5.1 Princípios básicos de braquiterapia.....	77
5.2 Dosimetria em Braquiterapia.....	86
5.2.1 Especificação da intensidade da fonte.....	87
5.2.2 Formalismo do cálculo de dose por AAPM Task Group 43	91
5.2.2.1 Kerma em ar	94
5.2.2.2 Constante de taxa de dose	95
5.2.2.3 Função geométrica, Função radial de dose e Função de anisotropia.....	96
6 Simulação Monte Carlo em braquiterapia	101
7 Conclusões.....	115
Referências.....	117
Anexo A - Relação entre os volumes e os sub-tipos.....	124

Lista de abreviações

AAPM	Associação Americana de Físicos em Medicina
AKR	Taxa de referência de Kerma em Ar
BCRU	Comité Britânico de Unidades e Medidas de Radiação
BT	Braquiterapia
CEMA	Energia convertida por unidade de massa
CFMRI	Comité Francês para a Medição de Radiações Ionizantes
CPE	Equilíbrio de partículas carregadas
CSDA	Aproximação de Desaceleração Continua
EXT	Terapia de feixe externo
HDR	Taxa de Dose Alta
ICBT	Braquiterapia intracavitária
ICRU	Comissão Internacional de Unidades e Medidas Radiológicas
K-N	Klein-Nishina
Kerma	Energia Cinética libertada num Material
LIBD	Sub-comité de Dosimetria de Braquiterapia intersticial do comité de Terapia com Radiação
MC	Monte Carlo
NIST	Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia

R-X	Raios-X
RM	Ressonância magnética
TC	Tomografia computadorizada
TCPE	Equilíbrio transiente de partículas carregadas
TG43	Formalismo de cálculo de dose do APM Task Group 43
TG43Update	Actualização do TG43
US	Ultra-som
WAFAC	Câmara de ar livre de ângulo de grande abertura

1 Introdução

A descoberta dos raios-X em 1895 por Röntgen marcaram o início de um novo ramo na física: a física médica. Tradicionalmente, a física médica lida com aplicações de radiações ionizantes à medicina: medicina nuclear, radiologia, e radioterapia (o campo de interesse nesta tese).

O objectivo da radioterapia é depositar uma dose de radiação num tumor, danificando o menos possível os tecidos normais à sua volta. A radioterapia está dividida em duas áreas principais: radioterapia externa, que lida com radiação produzida fora do paciente, e a braquiterapia, que lida com fontes radioactivas colocadas dentro do paciente. As fontes mais comuns em braquiterapia são as fontes de Ra-226, Cs-137, Ir-192, Co-60, Au-198, I-125, Pd-103, entre outras.

A comunidade de física das radiações, antes de 1940, deparou-se com diversas dificuldades para desenvolver tratamentos de braquiterapia aplicáveis a pacientes, devido à dificuldade de avaliar a dose aplicada nos tecidos. Este problema foi mais tarde solucionado através da utilização de dosímetros biológicos e químicos para mapear distribuições de dose em torno das sementes.

Nos últimos 50 anos deram-se vários desenvolvimentos que permitiram efectuar um melhor planeamento de tratamentos de braquiterapia, alterando drasticamente a sua aplicabilidade clínica, como por exemplo a evolução de novas tecnologias de computação e imageologia, permitindo uma melhor visualização e definição dos tumores.

Outro avanço importante foi a introdução de métodos de simulação para estimar distribuições de dose das fontes radioactivas, como o I-125.

As técnicas de simulação Monte Carlo (MC) tornaram-se conhecidas como um método numérico preciso devido à modelação detalhada dos processos físicos que conduzem à deposição de energia. Estas técnicas têm sido aplicadas à braquiterapia para a descrição de campos de radiação e cálculo de quantidades dosimétricas, permitindo o cálculo de distribuição de dose absorvida em tecidos biológicos.

Existem vários códigos de simulação MC, sendo alguns dos exemplos o EGS, GEANT, MCNP(X) e PENELOPE.

Trabalhar com códigos desenvolvidos por outras pessoas pode tornar-se um desafio pois nem todos os pormenores do seu desenvolvimento estão disponíveis para o utilizador.

O código PENELOPE é um código de simulação Monte Carlo que permite a simulação de interacção de fotões e electrões de baixas energias. Este código foi desenvolvido em *fortran* e para a sua utilização não é necessário um grande conhecimento desta linguagem.

Para proceder a uma simulação com este código MC, o utilizador tem de editar alguns ficheiros de configuração, dependendo do que pretende simular, obtendo-se no final os dados correspondentes à simulação efectuada. Todo este processo funciona de certo modo como uma caixa negra onde o utilizador introduz valores e saem dados.

No entanto, uma utilização mais complexa do PENELOPE pode dar origem a uma série de dificuldades. Em primeiro lugar porque a definição da geometria pode tornar-se muito confusa pois, no caso do PENELOPE, as geometrias são definidas por superfícies quadráticas (ver capítulo 3). Um outro problema que pode surgir deve-se à pouca transparência dos dados de saída.

Para colmatar estes dois possíveis problemas foi desenvolvido um pacote de geometria que se divide em duas partes: uma trata da geometria e outra da histogramação.

A dosimetria é um campo da física médica que trata da medição da dose depositada, sendo baseada na compreensão da natureza da radiação ionizante usada em radioterapia e nos métodos de detecção da radiação. A determinação da dose absorvida é um processo complexo composto por vários passos, sendo necessário um conhecimento detalhado dos processos básicos de interacção de partículas na matéria. Uma descrição mais pormenorizada da dosimetria será apresentada no Capítulo 2.

No Capítulo 3 serão apresentados de uma forma genérica os métodos de Monte Carlo e sendo apresentados vários exemplos de aplicações computacionais à física médica.

Após esta introdução geral é feita uma descrição mais pormenorizada do código PENELOPE, sendo este código o ponto de partida para todo o trabalho. No final do

capítulo é descrito todo o processo de desenvolvimento do pacote de geometria e histogramação, Ulysses.

O código desenvolvido (Ulysses) tem como objectivo base a sua aplicação em física médica, tendo sido desenvolvidas simulações de aplicações de braquiterapia como forma a testar as suas funcionalidades e é apresentado no Capítulo 4.

No Capítulo 5 é feita uma descrição mais pormenorizada da braquiterapia enquanto aplicação de radioterapia.

Por fim, no Capítulo 6 são apresentados os resultados das simulações desenvolvidas, assim como comparações com resultados já publicados.

No último capítulo são tiradas conclusões deste trabalho.

2 Dosimetria

2.1 Interações de fótons

Quando um feixe de raios-X ou raios- γ interage com a matéria (nomeadamente tecidos humanos) pode fazê-lo por intermédio de quatro processos: dispersão de Rayleigh, efeito fotoeléctrico, Compton e produção de pares.

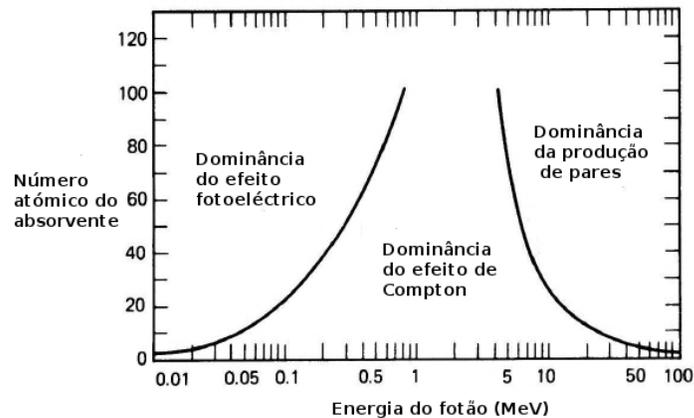


Figura 2.1 – Intervalo de dominância de cada um dos tipos de interação em função da energia e do número atômico [Knol89].

Na figura 2.1 encontra-se a descrição do tipo de interação dominante para energias de 0 a 100 MeV, para absorventes com números atômicos de 1 a 110.

2.1.1 Dispersão de Rayleigh

A dispersão de Rayleigh ou dispersão coerente consiste na colisão elástica de um fóton com um átomo. Os fótons incidentes são dispersos pelos electrões ligados do átomo sem haver no entanto quaisquer transferência de energia para o átomo. Este processo ocorre principalmente para fótons de baixa energia e materiais de Z elevado. A secção eficaz diferencial em função do ângulo sólido para a dispersão coerente é dada por

$$\frac{d\sigma_r^a}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos(\theta)^2) [F(\bar{q}, Z)]^2 \quad (\text{cm}^2\text{sr}^{-1}\text{atom}^{-1}) \quad (2.1)$$

onde $q=2k \sin(\theta/2)$ (com $k=\nu h/c$) é o momento transferido numa colisão com um ângulo de θ e $F(q,Z)$ é o factor de forma atómico [Hub79]. Quando $q \rightarrow 0$ porque $\theta \rightarrow 0$ então $F(q,Z) \rightarrow 1$.

2.1.2 Efeito fotoeléctrico

O efeito fotoeléctrico é o processo de interacção dissipativa dominante para fótons de baixas energias e envolve a absorção de fótons pelo átomo sendo consequentemente ejectado um electrão atómico. Este processo está esquematizado na figura 2.2. Numa primeira fase um electrão de um nível mais interno é ejectado por absorção de energia dos fótons incidentes. As duas figuras seguintes representam efeitos secundários que podem ocorrer após a emissão do fotoelectrão. A vaga na orbital mais interna será então preenchida por um electrão de uma orbital mais externa, o que leva a um excedente de energia que poderá ser emitido sob a forma de raios-X (esquema central) ou emissão de um electrão de Auger (esquema da direita).

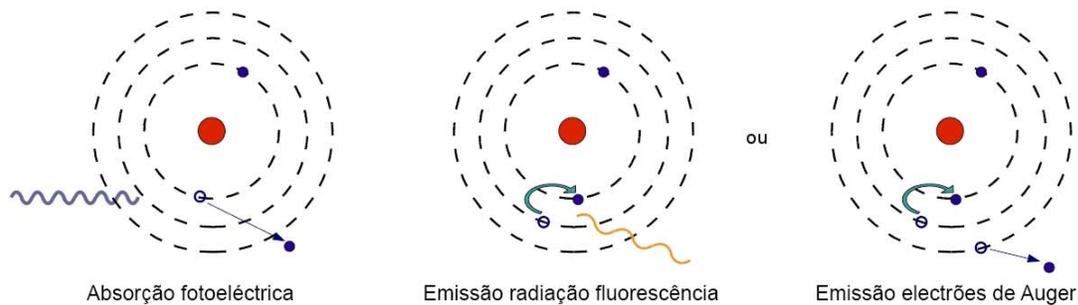


Figura 2.2 – Esquema do efeito fotoeléctrico [Per08].

O fotoelectrão, quando emitido, adquire uma energia cinética, T_e , igual a

$$T_e = h\nu - E_b \quad (2.2)$$

sendo $h\nu$ a energia do fóton e E_b a energia de ligação do electrão.

A interacção fotoeléctrica é mais provável quando a energia $h\nu$ do fóton é ligeiramente superior à energia de ligação do electrão numa determinada camada

atómica. Acima da energia da camada K, a probabilidade de absorção de um fóton, com uma energia suficientemente alta para ejectar um electrão com uma energia não relativista é dada aproximadamente por

$$\sigma_p^a \approx \sqrt{2} \frac{32 \pi r_e^2 \alpha^4}{3} \left(\frac{3 m_0 c^2}{h \nu} \right)^m Z^n \quad (2.3)$$

onde $\alpha=1/137$ é denominada constante de estrutura fina, m_0 e r_e são respectivamente a massa e raio clássico do electrão e Z o número atómico do material. O expoente n varia entre 4 ($h\nu < 100$ keV) e 4.6 ($h\nu > 500$ keV) e m varia entre 3 ($h\nu < 100$ keV) e 1 ($h\nu > 500$ keV) [Bie00].

Na região de $h\nu \leq 100$ keV, o efeito fotoeléctrico é relevante para energias acima da energia de ligação dos electrões atómicos do absorvedor, e a secção eficaz varia aproximadamente com Z^4 e $(h\nu)^{-3}$. O coeficiente de atenuação mássico do efeito fotoeléctrico, μ_P/ρ , varia com Z^3 e $(h\nu)^{-3}$. Após a ejeção do electrão atómico, o átomo fica num estado excitado com um buraco numa camada electrónica. A energia atómica excedente vai ser libertada por intermédio dos processos descritos anteriormente.

2.1.3 Efeito de Compton

O efeito de Compton consiste na interacção de fótons com electrões livres (o electrão é considerado livre desde que a sua energia de ligação seja muito menor do que a energia do fóton). Nesta interacção o fóton inicial é disperso e parte da energia inicial é transferida para o electrão ejectado.

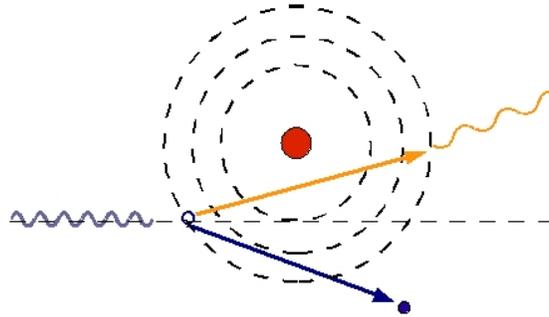


Figura 2.3 – Esquema do efeito de Compton [Per08]

O processo de colisão na interação de Compton é descrito pela aplicação de leis de conservação de momento e energia relativistas. Assim, a energia de recuo do electrão de Compton, T_{e^-} , em função do ângulo de dispersão é dada por

$$T_{e^-} = h\nu_0 \frac{\varepsilon(1 - \cos(\theta))}{1 + \varepsilon(1 - \cos(\theta))} \quad (2.4)$$

onde θ é o ângulo de dispersão do fóton, $\varepsilon = h\nu/m_e c^2$ é a energia reduzida e $m_e c^2 = 0.511$ MeV é a massa do electrão

$$\cot \varphi = (1 + \varepsilon) \tan(\theta/2) \quad (2.5)$$

A energia de dispersão do fóton, com um dado ângulo θ é dada por

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \varepsilon(1 - \cos(\theta))} \quad (2.6)$$

Klein e Nishina aplicaram a teoria relativista de Dirac ao efeito de Compton com o objectivo de obter melhor acordo da secção eficaz com os valores experimentais. A expressão de Klein-Nishina (K-N) [Kle29], para a secção eficaz diferencial por ângulo sólido e por electrão, para um fóton disperso com um dado ângulo é

$$\frac{d\sigma_e^c}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{h\nu'}{h\nu} \right) \left(\frac{h\nu'}{h\nu} + \frac{h\nu}{h\nu'} - \sin^2(\theta) \right) \quad (\text{cm}^2\text{sr}^{-1}\text{electrão}^{-1}) \quad (2.7)$$

A secção eficaz total por electrão obtém-se da integração da equação 2.7 sobre todos os ângulos de dispersão

$$\sigma_e^c = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon^2} \left[\frac{2(1+\varepsilon)}{1+2\varepsilon} - \frac{\ln(1+2\varepsilon)}{2\varepsilon} \right] + \frac{\ln(1+2\varepsilon)}{2\varepsilon} - \frac{1+3\varepsilon}{(1+2\varepsilon)^2} \right\} \quad (\text{cm}^2\text{electrão}^{-1}) \quad (2.8)$$

Para fótons incidentes com $h\nu \leq 100$ keV, a secção eficaz de K-N para electrões é quase igual à secção eficaz de Thompson. A partir desta energia a secção eficaz vai decrescendo gradualmente tornado-se proporcional a $(h\nu)^{-1}$.

O coeficiente de atenuação mássico de Compton μ_c/ρ , é aproximadamente independente de Z, pois

$$\frac{\mu_c}{\rho} = \left[N_A \left(\frac{Z}{A} \right) \right] \sigma_c^e \quad (\text{cm}^2/\text{g}) \quad (2.9)$$

onde a razão Z/A é igual a 1 para o hidrogénio e aproximadamente 0.45 ± 0.05 para todos os outros elementos.

2.1.4 Produção de pares e tripletos

Quando a energia do fóton incidente é maior do que 1.022 MeV, pode ocorrer interacção com o campo nuclear de Coulomb, em que o fóton dá origem a um par electrão-positrão (e^-, e^+).

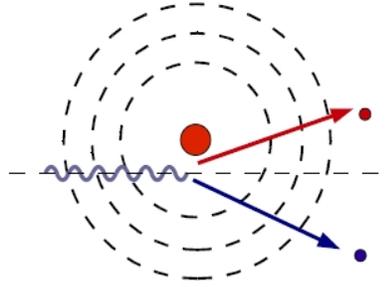


Figura 2.4 – Esquema da produção de pares [Per08]

Devido à grande massa do núcleo, a energia transferida para este é inteligível, sendo parte da energia do fóton ($h\nu$) convertida num par electrão-positrão, cuja massa de repouso é 1.022 MeV, e a restante energia é distribuída sobre forma de energia cinética do electrão e do positrão, T_{e^-} e T_{e^+} respectivamente.

Neste caso, a secção eficaz dada pela equação 2.11, em que ξ , que é dado por

$$\xi = \frac{100 m_0 c^2 h \nu}{E_- E_+ Z^{1/3}} \quad (2.10)$$

onde E_+ e E_- são, respectivamente, a energia total do positrão e do electrão. Para energias ultra-relativistas e dispersão arbitrária, a aproximação de Born leva a

$$\frac{d\sigma_{pp}^{\alpha}}{dE_-} = \frac{4Z^2 r_e^2 \alpha}{(h\nu_0)^3} \left\{ (E_-^2 + E_+^2) \left[\frac{\phi_1(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] + \frac{2}{3} E_- E_+ \left[\phi_2(\xi) \frac{(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] \right\} \quad (2.11)$$

onde $\alpha=1/137$ é a constante de estrutura fina, $\phi_1(\xi)$ e $\phi_2(\xi)$ são as funções de *screening* e $f(Z)$ é a função de correcção de Coulomb. Para obter a secção eficaz total da produção de pares, basta integrar a equação 2.11.

A secção eficaz total é proporcional a Z^2 e aumenta com o logaritmo da energia do fóton incidente [Bie00]

$$\sigma_{pp}^a \propto Z^2 \ln\left(\frac{2h\nu}{m_0 c^2}\right) \quad (2.12)$$

A produção de pares pode também ocorrer no campo electrónico do átomo. Nesse caso a interacção envolve três partículas: um par electrão-positrão e um electrão ejectado da orbital. Este processo é denominado como produção de tripletos. Para ajustar a aproximação de Born a este caso basta trocar Z^2 por $Z(Z+1)$ na equação 2.12. O coeficiente de atenuação na produção de pares, μ_{pp}/ρ , é proporcional a Z pois

$$\begin{aligned} \mu_{pp} &= \frac{\sigma_{pp} N_A \rho}{A} \Leftrightarrow \frac{\mu_{pp}}{\rho} = \frac{\sigma_{pp} N_A}{A} \times \frac{Z}{Z} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \frac{\mu_{pp}}{\rho} = \frac{\sigma_{pp}^a}{Z} \left[N_A \left(\frac{Z}{A} \right) \right] \quad (2.13) \end{aligned}$$

e Z/A é aproximadamente constante.

2.1.5 Coeficiente de atenuação total

A intensidade de radiação atenuada numa dada espessura de um absorvente é medida pelo coeficiente de atenuação, μ , que é dependente da energia do feixe e do tipo de material absorvente. Geralmente usa-se o coeficiente de atenuação mássico para quantificar a atenuação em certos materiais, uma vez que esta grandeza é independente da densidade do material. O coeficiente total de atenuação mássico, μ/ρ , é a soma dos coeficientes de atenuação mássicos de todos os efeitos anteriormente descritos, ou seja,

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{\mu_p}{\rho} + \frac{\mu_c}{\rho} + \frac{\mu_r}{\rho} + \frac{\mu_{pp}}{\rho} \quad (\text{em cm}^2\text{g}^{-1}) \quad (2.14)$$

onde μ_p/ρ , μ_r/ρ , μ_c/ρ e μ_{pp}/ρ representam respectivamente coeficientes de atenuação mássico dos efeitos fotoeléctrico, Rayleigh, Compton, produção de pares e fotonuclear. As figura 2.5 e 2.6 mostram respectivamente a secção eficaz em água e tungsténio dos efeitos referidos.

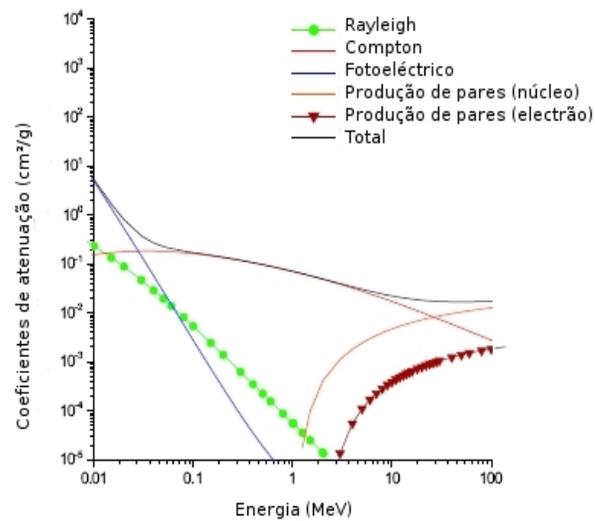


Figura 2.5 – Coeficientes de atenuação mássico total e parciais para várias contribuições em água [Cha04].

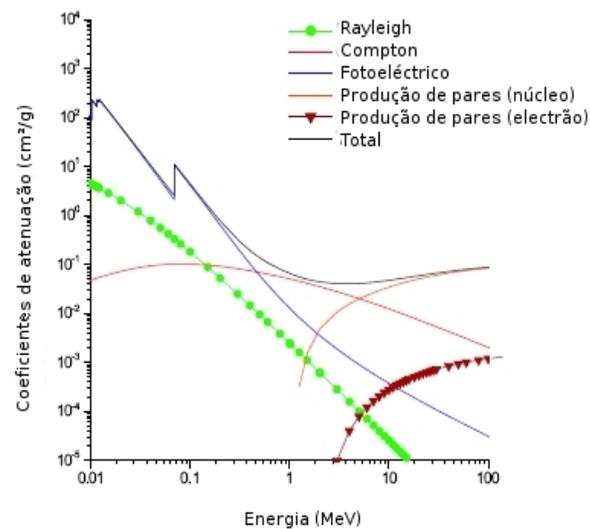


Figura 2.6 – Coeficientes de atenuação mássico total e parciais para várias contribuições em tungsténio [Cha04].

O coeficiente de atenuação total é maior para fotões de energias mais baixas devido a uma grande contribuição do efeito fotoeléctrico. Pode-se notar também que, para baixas energias, μ/ρ é maior para o tungsténio do que para a água pois

existe uma dependência com Z^3 que vem do μ_p . A energias elevadas verifica-se que a produção de pares é o processo dominante. Na gama de energias usada em aplicações de radioterapia, onde os tecidos têm propriedades muito semelhantes às da água, domina o efeito de Compton. Nesta região, como a secção eficaz de Compton é quase proporcional a Z , os coeficientes de atenuação mássica da água e do tungsténio não são significativamente diferentes.

2.2 Interação de electrões

Entre os processos de dispersão inelástica de fótons com a matéria, alguns incluem electrões e/ou positrões que quando interagem com o meio transferem a sua energia para os electrões atómicos através de vários processos como a colisão electrão-electrão (dispersão de Møller), colisão positrão-electrão (dispersão de Bhabha), excitação atómica, emissão de *bremsstrahlung* e aniquilação de positrões. Além dos processos descritos antes, os electrões (e positrões) podem ainda interagir com a matéria por intermédio da dispersão de Coulomb com núcleos e electrões orbitais.

	Processo
Dispersão de Møller	$e^-e^- \rightarrow e^-e^-$
Dispersão Bhabha	$e^+e^- \rightarrow e^+e^-$
Excitação atómica	$e^\pm N \rightarrow e^\pm N^*$
<i>Bremsstrahlung</i>	$e^\pm N \rightarrow e^\pm N^* \gamma$
Aniquilação	$e^+e^-, \gamma\gamma$
Dispersão Elástica	eN, eN

Tabela 2.1 – Principais processos de interacção de positrões e electrões com a matéria.

As colisões elásticas ou inelásticas são mecanismos pelos quais os electrões, no campo de Coulomb de electrões atómicos ligados aos núcleos, perdem a sua energia cinética ou são deflectidos [Kha84].

2.2.1 Colisão inelástica com electrões atómicos

Interações de Coulomb com os electrões atómicos ligados são a principal

forma de perda de energia dos electrões livres. Ao longo do percurso de um electrão livre, este induz excitações e ionizações que, por vezes, permitem que um átomo receba energia suficiente para produzir um electrão secundário. Estes electrões secundários podem ser designados raios- δ . Os electrões sujeitos a interações de Coulomb podem ser descritos através da comparação da dimensão do parâmetro de impacto b com o raio atómico clássico, tal como está ilustrado na figura 2.7.

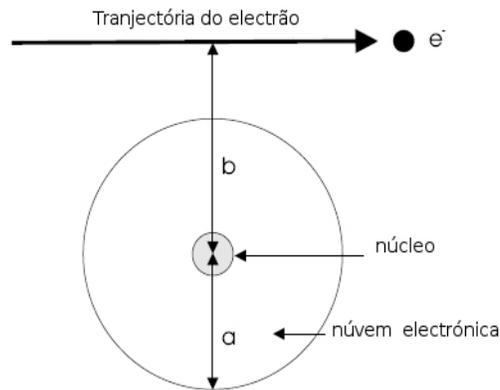


Figura 2.7 – Parâmetros para uma colisão de electrões com um átomo com um raio clássico do átomo, a e o parâmetro de impacto b [Cha04].

No processo de excitação um electrão livre sofre uma colisão com um átomo, transferindo para este energia suficiente para que um dos seus electrões ligados passe para uma camada mais exterior. A energia requerida por este processo é da ordem de 10 a 100 eV, pelo que a perda de energia para a excitação atómica é pequena. Todos estes tipos de colisões são denominados como *colisões ligeiras* e verificam-se quando o parâmetro de impacto clássico b é muito maior do que o raio atómico a ($b \gg a$). Quando o parâmetro b é da ordem do raio atómico a ($b \approx a$), o electrão irá interagir com um único electrão de uma orbital atómica que irá receber a maior parte da energia cinética do electrão incidente. Este tipo de colisões denominam-se como *colisões duras*. Por vezes o electrão incidente tem energia suficiente para remover um electrão da camada, ficando o átomo ionizado

[Kle84]. O electrão removido é chamado de raios- δ , se transportar energia em excesso de cerca de 100 eV, e a colisão é denominada de evento catastrófico.

No modelo da interacção de Coulomb entre o primeiro electrão rápido e o electrão ligado no meio (colisão electrão-electrão), o electrão primário transfere energia, ΔE_b , para o electrão ligado, considerado livre, sendo esta energia dada por [Leo86]:

$$\Delta E_b = 2 \frac{e^4}{m_0 b^2 v^2} \quad (2.15)$$

onde e é a carga do electrão, b o parâmetro de impacto clássico e v a velocidade do electrão primário. Møller derivou a secção eficaz relativista para as interacções de Coulomb entre electrões livres e obteve a secção eficaz diferencial em energia cinética, T , para a dispersão de um electrão que está inicialmente em repouso, a qual é:

$$\frac{d\sigma_{col}}{dT} = \frac{2\pi r_e^2 m_0}{\beta^2} \frac{1}{T^2} \left[1 + \frac{T^2}{(T_0 - T)^2} + \frac{\tau^2}{(\tau + 1)^2} \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 - \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2} \frac{T}{T_0 - T} \right] \quad (2.16)$$

onde $\beta = v/c$, T_0 é a energia cinética do electrão incidente e $\tau = T_0/mc^2$ a energia cinética do electrão em unidades de massa de electrão. Devido à indiferenciabilidade das cargas do electrão, a equação 2.16 é simétrica em relação à mudança de energia nas duas partículas dispersas e a energia máxima transferida é de $T_0/2$. Por definição, um electrão com uma alta energia depois da colisão é considerado primário. A secção eficaz de Møller é válida para electrões primários com energia cinética muito maior que as energias de ligação do átomo no meio tendo que ser modificada para electrões para energias cinéticas próximas das energias de ligação.

2.2.2 Colisão inelástica de um electrão com o um núcleo

Quando o electrão incidente está perto do núcleo atómico ocorrem interacções com o campo de Coulomb do núcleo. A maioria destas interacções são colisões

quasi-elásticas, “quase” sem modificação da energia do electrão. No entanto, por vezes ocorrem interacções de Bremsstrahlung duras, também denominadas de *colisões radiativas*.

Sobre a influência do campo de Coulomb nuclear, o electrão incidente é deflectido da sua trajectória com perda de energia por emissão de radiação, ficando o fotão com uma fracção da energia cinética do electrão, a qual pode ir até à totalidade da sua energia média. Isto significa que as perdas por radiação podem ser maiores do que para colisões electrão-electrão.

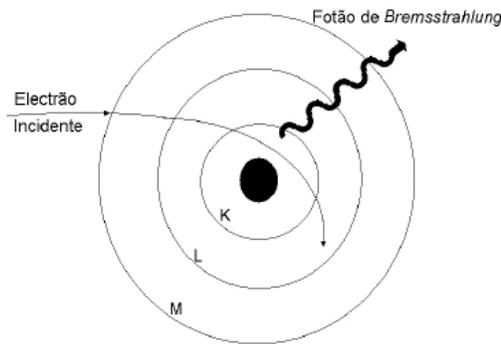


Figura 2.8 – Representação esquemática da produção de *bremsstrahlung* [Soa07].

A secção eficaz de *bremsstrahlung* para um electrão incidente com uma energia total E_0 num átomo com um número atómico Z , em função da energia do fotão, corresponde à integração angular das direcções de emissão do fotão e do electrão, dado pela equação de Koch e Motz:

$$\frac{d\sigma_{brem}}{dk} = \frac{4Z^2 r_e^2 \alpha}{k} \left\{ (1 + \epsilon^2) \left[\frac{\phi_1(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] - \frac{2}{3} \epsilon \left[\frac{\phi_2(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] \right\} \quad (2.17)$$

onde $\alpha=1/137$ é a constante de estrutura fina, $\epsilon = E/E_0$ onde E é a energia do electrão totalmente disperso, $f(Z)$ o factor de correcção de Coulomb para $\beta \gg \alpha Z$. As funções $\phi_1(\xi)$ e $\phi_2(\xi)$ têm em conta os efeitos de Blindagem com

$$\xi = \frac{100 m_0 c^2 h \nu}{E_0 E Z^{1/3}} \quad (2.18)$$

A equação 2.17 é resultado do cálculo da aproximação de Born e não é válida para electrões incidentes de baixas energias.

A secção eficaz de *bremsstrahlung*, $d\sigma_{brems}/d(h\nu)$ varia aproximadamente com $1/(h\nu)$. Devido à dependência em Z^2 de $d\sigma_{brems}/d(h\nu)$, as colisões radiativas são mais importantes para materiais com um Z grande do que um Z pequeno.

Para electrões incidentes de baixa energia, a intensidade de produção de RX é máxima na direcção perpendicular ao movimento do electrão. No caso de um electrão de energias relativistas, a distribuição angular dos fotões emitidos apresenta um pico distinto. O valor médio para a distribuição angular dos fotões emitidos é dado por:

$$\bar{\theta} = \frac{m_0 c^2}{E_0} \quad (2.19)$$

2.2.3 Dispersão elástica

Numa dispersão elástica nuclear, o electrão incidente é deflectido sem emissão de radiação ou excitação do núcleo, perdendo apenas a energia cinética necessária para a conservação do momento entre duas partículas [Eva55]. Numa dispersão elástica com os electrões atómicos, o electrão incidente interage com o átomo como um todo e é deflectido elasticamente. Ignorando os efeitos de spin e de *screening*, colisões com átomos são individualmente descritas pela fórmula de Rutherford [Rut11]:

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \frac{r_e^2 Z^2 e^4 m_0 c / \beta p}{4 \sin^4(\theta/2)} \quad (2.20)$$

onde p é o momento do fotão incidente e θ é o ângulo polar de dispersão. Devido à sua dependência de $1/\sin^4(\theta/2)$, a vasta maioria das colisões resulta, portanto, numa pequena deflexão angular do electrão. Com a diferença de massa entre o núcleo e o electrão, é possível desprezar a energia transferida para o núcleo.

Assim o efeito cumulativo das dispersões com pequeno ângulo é uma deflexão da direcção original do electrão. Em geral, o tratamento da dispersão de Coulomb é dividida em três partes:

- *dispersão singular*, para espessuras finas de material absorvedor no qual a probabilidade de ocorrência de mais uma dispersão de Coulomb seja pequena e conseqüentemente a distribuição angular é dada pela equação 2.20.
- *dispersão plural*, quando o número de colisões é menor ou igual a 20, correspondendo a uma região de transição entre dispersões de pequenos e grandes ângulos.
- *dispersão múltipla*, quando o número médio de colisões independentes é superior a 20. Neste regime recorre-se a métodos estatísticos para obter distribuições de probabilidade do ângulo cumulativo de pequenas deflexões angulares em função da espessura do material absorvedor.

2.2.4 Secções eficazes total para electrões

A figura 2.9 mostra que as secções eficazes totais para os diferentes processos, elástico e inelástico.

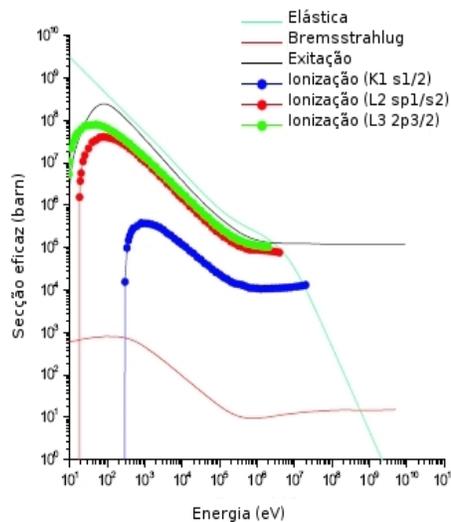


Figura 2.9 – Secção eficaz total para o carbono ($Z=6$) representando as ionizações em três camadas atômicas (dispersão de Møller) e os processos de excitação, Bremsstrahlung e dispersão elástica [Cha04].

A figura mostra claramente que, para o Carbono, com energias do electrão incidente entre 10 eV e 5 MeV, o processo elástico é mais provável de ocorrer negligenciando a contribuição da perda de energia do electrão. Entre 10 eV e 10 GeV o processo de excitação é o processo inelástico dominante. A secção eficaz total para a ionização é maior para as camadas atómicas externas do que para as internas devido a baixa energia de ligação dos electrões orbitais.

Para energias que são relevantes em radioterapia (alguns MeV), o processo de excitação é o principal mecanismo de perda de energia do electrão incidente.

Na figura é ainda possível notar-se que o processo de *bremsstrahlung* no carbono ocorre raramente devido à sua baixa secção eficaz de interacção.

2.3 Poder de paragem dos electrões

Como já foi referido, durante o seu percurso pela matéria, as partículas carregadas vão perdendo alguma da sua energia por intermédio de interacções. Esta perda de energia é geralmente gradual e em vários passos, pelo que um electrão, ao contrário do que acontece geralmente com um fóton, sofre várias interacções/colisões antes de perder toda a sua energia.

As colisões inelásticas ocorrem de acordo com uma certa probabilidade, contudo as flutuações na perda total de energia são pequenas, pois a densidade de colisões é, em geral, muito grande. Assim, a penetração do electrão no meio pode ser descrita pela *Continuous Slowing Down Approximation* (CSDA), a qual assume que a partícula perde a sua energia de forma linear e continuamente enquanto percorre o meio. Assim, podemos descrever de uma forma simplificada a energia média perdida por unidade de distância ao longo do percurso percorrido de uma partícula por intermédio do *poder de paragem* que é descrito como

$$S = -\frac{dE}{dx} \quad (\text{MeV/cm}) \quad (2.21)$$

O quociente S/ρ , designado como *poder de paragem mássico* ($\text{MeV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$), embora não elimine, reduz significativamente a dependência da densidade, ρ , do

meio [ICR84].

Como os electrões perdem energia por colisões inelásticas, a relação S/ρ deverá incluir então as perdas de energia devidas a todas as colisões inelásticas. Esta relação pode então ser dividida em duas componentes [ICR99]:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{total} = \left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} + \left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad} \quad (2.22)$$

onde $(S/\rho)_{col}$ representa a perda de energia por processos de ionização e $(S/\rho)_{rad}$ representa as perdas de energia por processos radiativos. Esta distinção entre perdas de energia é importante pois a dose absorvida num meio será diferente: a energia é depositada ao longo da área que circunda o traço de ionização do electrão devido a colisões inelásticas com electrões atómicos, enquanto que a energia transportada imediatamente desde o ponto de interacção por *bremsstrahlung* não contribui localmente para a dose.

O *poder de paragem mássico de colisão* descreve uma média da perda de energia de uma partícula carregada num determinado número de colisões e é dada [Ber82]:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} = \frac{N_A Z}{A} \int_{\omega_{min}}^{\omega_{max}} \omega \frac{d\sigma}{d\omega} d\omega \quad (2.23)$$

onde $d\sigma/d\omega$ é a secção eficaz (por electrão) para os processos de ionização e excitação com energias transferidas com uma magnitude ω . No caso de um electrão com uma energia média de T_0 , ω_{max} é igual a $T_0/2$ e ω_{min} representa o mínimo abaixo do qual não ocorrem processos de ionização ou excitação. Isto é, o resultado da interacção é uma perda de energia ω entre ω_{max} e ω_{min} . Bethe e Bloch desenvolveram uma teoria para calcular $(S/\rho)_{col}$ para electrões tendo obtido a seguinte expressão [Leo86]

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} = \frac{2\pi r_e^2 m_0 c^2}{\beta^2} \left(\frac{N_A Z}{A}\right) \left[\ln \frac{\tau^2(\tau+2)}{2(I/m_0 c^2)} + F(\tau) - \delta - 2\frac{C}{Z} \right] \quad (2.24)$$

com

$$F(\tau) = 1 - \beta^2 + \frac{\left[\frac{\tau^2}{8} - (2\tau + 1) \ln 2 \right]}{(\tau + 1)^2} \quad (2.25)$$

onde $\beta = v/c$, v é a velocidade do electrão, $\tau = T_0/(m_0c^2)$, $N_A Z/A$ é o número de electrões médio por grama, l é a energia média de excitação.

O poder de paragem mássico radiativo $(S/\rho)_{rad}$ dá a taxa, em MeV.cm².g⁻¹, de produção de radiação de travagem - *bremsstrahlung* - por electrão e é dado por

$$\left(\frac{S}{\rho} \right)_{rad} = \sigma_0 \frac{N_A Z^2}{A} (T_0 + m_0 c^2) \bar{B}_r \quad (2.26)$$

onde $\sigma_0 = (1/137)(e^2/(m_0c^2))$, T_0 é a energia cinética incidente e \bar{B}_r uma função que varia muito lentamente com Z e T_0 . Para $T_0 \gg m_0c^2$ (energias ultra-relativistas), a equação 2.26 torna-se

$$\left(\frac{S}{\rho} \right)_{rad} \propto \frac{Z^2}{A} T_0 \bar{B}_r \quad (2.27)$$

Isto implica que $(S/\rho)_{rad}$ aumenta com a energia cinética T_0 e é quase linear acima de 0.5 MeV.

A figura 2.10 compara os poderes de paragem radiativos do osso compacto (ICRU) e da água. O poder de paragem radiativo é maior no osso do que na água devido à sua dependência em Z^2/A .

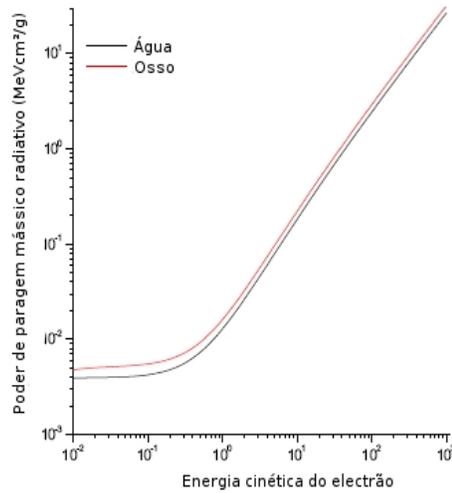


Figura 2.10 – Comparação entre os poderes de paragem radiativos do osso compacto (ICRU) e a água [Cha04].

Uma medida bastante útil em radioterapia é a razão S_{rad}/S_{col} , representada na figura 2.11 para vários materiais de interesse nesta área. Como é possível observar na figura, esta razão apresenta uma proporcionalidade com ZT_0 . Assim, uma aproximação usada muito frequentemente é

$$\frac{\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad}}{\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col}} = \frac{Z T_0}{1600 m_0 c^2} \quad (2.28)$$

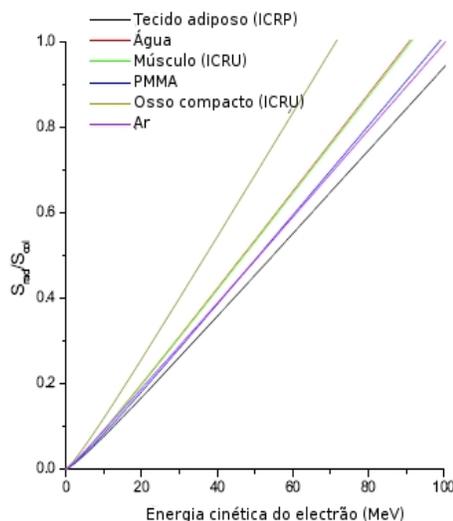


Figura 2.11 – A dependência da energia e do material do poder de paragem radiativo e de colisão, S_{rad}/S_{col} , para vários meios de interesse em dosimetria médica [Cha04].

Para materiais com baixo número atómico, como a água, a energia crítica (T_c) encontra-se acima de 90 MeV. Para materiais com alto Z como o Pb, T_c é cerca de 7 MeV.

Na figura 2.12 está representado o poder de paragem total e parcial de electrões em água. Através da figura pode-se observar que as perdas de energia por colisão são o efeito dominante na gama de energias relevantes em radioterapia. As perdas de energia por radiação só se tornam importantes acima de $T_c \approx 93$ MeV. Da figura é ainda possível observar uma ligeira dependência de $(S/\rho)_{total}$ com T_0 e verificar que o mínimo de $(S/\rho)_{total}$ ocorre aproximadamente a $T_0 = 2$ MeV para quase todos os meios relevantes em radioterapia.

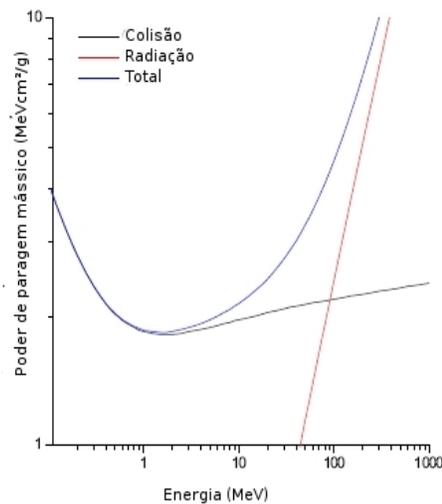


Figura 2.12 – Poderes de paragem total, de colisão e radiativo para electrões em água.

[Cha04]

2.4 Determinação da dose absorvida

A Comissão Internacional de Unidades e Medidas Radiológicas (ICRU) definiu algumas unidades fundamentais em dosimetria como fluência, kerma e dose absorvida, que serão descritas nesta secção.

2.4.1 Fluência

A fluência caracteriza o campo de radiação quanto ao número de partículas que atravessam uma determinada região do espaço.

A fluência é definida como o quociente:

$$\Phi = \frac{dN}{da} \quad (\text{m}^{-2}) \quad (2.29)$$

em que dN representa o número de partículas incidentes numa esfera de secção recta da.

Para a definição de fluência não importa a direcção das partículas, sendo esta definição aplicada a qualquer tipo de partícula ou feixe. Pode-se também definir uma taxa (ou débito) de fluência como sendo:

$$\varphi = \frac{d\Phi}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dN}{da} \right) \quad (\text{m}^2\text{s}^{-1}) \quad (2.30)$$

Por vezes é mais comum usar a taxa de fluência que a fluência, uma vez que as medidas são realizadas num intervalo de tempo.

2.4.2 Fluência energética

Para um feixe de partículas monocromático define-se a fluência energética como a razão

$$\Psi = \frac{dR}{da} = E \frac{dN}{da} \quad (\text{J m}^{-2}) \quad (2.31)$$

em que dR é a energia radiante que entra numa esfera de secção recta. A energia radiante R é basicamente a energia cinética das partículas que estamos a contabilizar sendo excluída do cálculo a energia relativa à massa das partículas do feixe. Define-se taxa de fluência energética como sendo:

$$\psi = \frac{d\Psi}{dt} = \frac{d}{dt} \left(E \frac{dN}{da} \right) \quad (\text{J m}^{-2}\text{s}^{-1} \rightarrow \text{W m}^{-2}) \quad (2.32)$$

2.4.3 Kerma

A energia cinética libertada no material, Kerma (*Kinetic Energy Released in Material*), também representada por K , é definida como:

$$K = \frac{d\bar{E}_{tr}}{dm} \quad (2.33)$$

onde $d\bar{E}_{tr}$ é a soma das energias cinéticas iniciais de todas as partículas carregadas produzidas/libertadas por radiação ionizante não carregada, numa porção de massa dm . Kerma expressa-se em Gy com $1\text{Gy}=1\text{J/kg}$. A sua relação com a fluência de fotões é a seguinte:

$$K = \phi \frac{\mu}{\rho} \bar{E}_{tr} \quad (2.34)$$

onde μ/ρ é o coeficiente de atenuação mássico de fotões no meio. O produto $\Phi(\mu/\rho)$ representa o número de fotões por interacção por unidade de massa. A equação 2.34 é válida para um feixe monocromático de fotões. Um feixe real não é monocromático, pelo que a equação 2.32 tem que ser integrada sobre as várias energias ficando:

$$K = \int_0^{h\nu_{max}} \frac{d\phi(h\nu)}{(h\nu)} \left(\frac{\mu(h\nu)}{\rho} \right) \bar{E}_{tr}(h\nu) \cdot d(h\nu) \quad (2.35)$$

Na figura 2.14 está esquematizado o conceito de kerma no caso de um feixe de fotões.

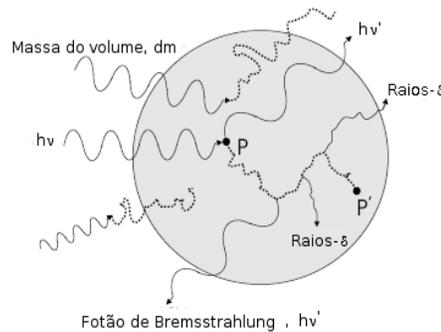


Figura 2.13 – Ilustração da energia transferida num meio de massa dm por um fotão de energia $h\nu$. O fotão interage com o meio no ponto P e transfere alguma da sua energia na forma de energia cinética do electrão. O electrão, por sua vez, transfere a sua energia para o meio através de pequenas colisões entre o ponto P e P'. A energia transferida por unidade de massa em P é designada por Kerma. Um dos raios- δ transporta a energia para fora do volume de massa dm [Cha04].

2.4.4 Dose absorvida

A *dose absorvida* é a quantidade mais importante em dosimetria de radiação e é definida como:

$$D = \frac{d \bar{E}_{ab}}{dm} \quad (2.36)$$

onde $d \bar{E}_{ab}$ é a energia ionizante média absorvida num volume de massa dm . Tal como o Kerma, a dose absorvida é expressa em Gy. Usando o esquema da figura 2.14 como exemplo, a dose absorvida é a energia transferida para o meio pelas partículas secundárias (P e P'), excluindo a energia que escapa o volume (energia de dispersão dos fotões - $h\nu'$, energia dos fotões de *bremsstrahlung* - $h\nu''$ e a parte da energia dos raios- δ que escapa o volume).

Na equação 2.36 assume-se que as flutuações estatísticas são negligíveis no segmento de massa dm . No entanto é necessário ter em atenção a dimensão de dm , pois se este for demasiado pequeno as flutuações estatísticas deixam de ser negligíveis e a equação 2.36 deixa de ser válida.

2.4.5 Equilíbrio de partículas carregadas

O conceito de *Charged Particle Equilibrium* – equilíbrio de partículas carregadas (CPE) é muito importante em dosimetria de radiação. Como o Kerma e a dose absorvida não ocorrem no mesmo ponto, uma expressão semelhante à equação 2.32 não pode ser aplicada para calcular a dose absorvida, a menos que exista equilíbrio electrónico no elemento onde está a ser efectuado o cálculo.

Recorrendo à figura 2.14 como exemplo, o número de electrões secundários a entrarem e a pararem dentro do elemento de massa dm têm de ser igual ao número de electrões secundários criados e que saiam do mesmo volume. A figura 2.14 também é útil para introduzir algumas definições. Em condições CPE, o kerma e a dose absorvida estão relacionados pela seguinte relação:

$$D = \phi \frac{\mu}{\rho} \bar{E}_{ab} = K (1 - g) = K_{col} \quad (2.37)$$

onde g é a fracção de energia dos electrões perdida nos processos radiativos e K_{col} denomina-se como o *kerma de colisão*.

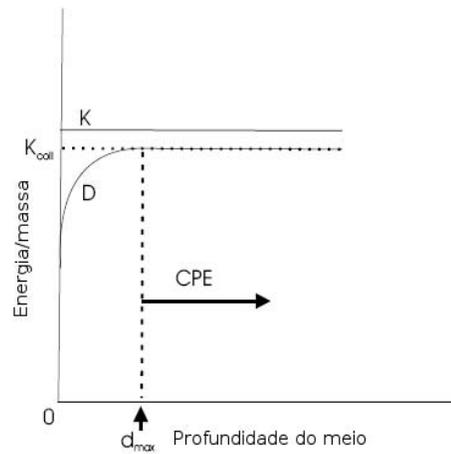


Figura 2.14 – Gráfico de quantidade kerma (K), dose absorvida (D) e kerma de colisão (K_{col}) em função da profundidade com a condição de equilíbrio de partícula carregada [Cha04].

Na prática, um equilíbrio entre partículas carregadas é virtualmente impossível de atingir. Nos feixes de fótons a atenuação do meio onde os fótons fluem não permanece constante e assim o número de electrões a serem produzidos a diferentes profundidades também não é constante. Mesmo que o verdadeiro CPE não exista, há situações em que temos:

$$D \propto K_{col} \quad (2.37)$$

Em situações particulares temos o chamado *Transient Charged Particle Equilibrium* - equilíbrio transiente de partículas carregadas (TCPE). Na figura 2.15, estão representadas as quantidades K , D e K_{col} em função da profundidade do meio, estando também assinalada uma região de TCPE [Att86]. Nas condições TCPE, as curvas que representam K , D e K_{col} estão paralelas e, se as interações para processos radiativos e os fótons dispersos forem ignorados, a uma profundidade d temos a seguinte relação [Gre81]:

$$D(d) = K_{col}(d) e^{\mu \bar{x}} \quad (2.38)$$

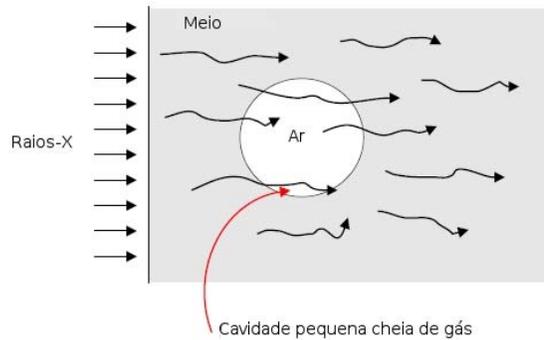


Figura 2.16 – Uma cavidade de Bragg-Gray num meio atravessado por traços de electrões [Cha08].

Primeiro, a dimensão da cavidade tem de ser pequena de modo a não alterar a fluência de electrões no meio, isto é, assume-se que a fluência de electrões que atravessa o meio é idêntica à existente no ponto de interesse no meio, na ausência de cavidade. Segundo, a dose absorvida na cavidade deve ser depositada pelos electrões, libertados no meio circundante pelos fotões, que passam pela cavidade. Assumindo que existem condições CPE, a dose D_m para um meio m , é igual a uma quantidade chamada CEMA (*Converted Energy per unit Mass* – energia convertida por unidade de massa) [ICR98] dada por:

$$D_m = \Phi_T \left(\frac{S_T}{\rho} \right)_{col}^m \quad (2.40)$$

onde $(S_T/\rho)_{col}^m$ é o poder de paragem de colisão num dado meio para electrões com uma energia cinética T e Φ_T é a fluência dos electrões primários com energia cinética T . O poder de paragem de colisão é usado porque estamos interessados na energia depositada localmente, e não no poder de paragem total, o qual inclui a energia perdida sob a forma de *bremstrahlung*, que iria escapar. Sob as condições da teoria da cavidade de Bragg-Gray, a dose depositada num meio D_m está relacionada com a dose na cavidade D_c do seguinte modo:

$$\frac{D_c}{D_m} = \frac{(S_T/\rho)_{col}^c}{(S_T/\rho)_{col}^m} = \left(\frac{S}{\rho}\right)_m^c \quad (2.41)$$

onde $(S/\rho)_m^c$ é a taxa de poder de paragem mássico de colisão num meio c e m para electrões com uma energia cinética T . Para feixes compostos por um espectro de energias de electrão, $(S_T/\rho)_{col}^m$ é substituído pelo valor médio do poder de paragem mássico de colisão que é dado por

$$\left(\frac{\bar{S}}{\rho}\right)_{col}^m = \frac{\int_0^{T_{max}} \Phi(T)(S(T)/\rho)_{col}^m dT}{\int_0^{T_{max}} \Phi(T) dT} \quad (2.42)$$

e a equação 2.40 torna-se

$$\frac{D_c}{D_m} = \frac{(\bar{S}/\rho)_{col}^c}{(\bar{S}/\rho)_{col}^m} = \left(\frac{\bar{S}}{\rho}\right)_m^c \quad (2.43)$$

A dose absorvida numa cavidade de ar D_c pode ser determinada pela medição da carga Q produzida no gás usando a seguinte relação:

$$D_c = \frac{Q}{m_{ar}} \bar{W}_{ar} \quad (2.44)$$

onde $\bar{W}_{ar} = 33.97 \text{ J/c}$ é a energia média necessária para criar um par de iões no ar [IAE00] é m_{ar} é a massa de ar na cavidade na qual é produzida a carga Q . Usando a teoria da cavidade de Bragg-Gray (2.39), a dose num meio D_m é dada por:

$$D_m = \frac{Q}{m_{ar}} \bar{W}_{ar} \left(\frac{\bar{S}}{\rho}\right)_{ar}^m \quad (2.45)$$

2.5.2 Teoria da cavidade de Spencer-Attix

Na teoria da cavidade de Bragg-Gray, assume-se que a cavidade é pequena e

não perturba o campo de radiação que passa por ela. Por outras palavras, não ocorre qualquer interacção na cavidade.

No caso dos electrões esta condição é muito difícil de obter, a menos que a parede e o meio gasoso tenham números atómicos aproximados. Na teoria de Spencer-Attix, esta falha é colmatada com a introdução dos raios- δ nos cálculos, o que permite corrigir as falhas da teoria de Bragg-Gray com cavidades de ar, especialmente as que têm paredes de números atómicos elevados.

Ao ter em conta os raios- δ a teoria de Spencer-Attix considera a variação observada na densidade de ionização com o tamanho da cavidade. Esta alteração é particularmente importante para cavidades pequenas o suficiente para satisfazerem as condições da teoria de Bragg-Gray e representa uma melhoria, demonstrando melhor concordância com os resultados experimentais, sobretudo em casos de cavidades de pequenas dimensões.

A fluência de electrões secundários na teoria de Spencer-Attix é dividida em duas componentes baseadas num limiar de energia definido pelo "utilizador" Δ , o qual está intimamente relacionado com o tamanho da cavidade. Os electrões secundários com energia cinética T , menor que Δ , são considerados electrões lentos que depositam a sua energia localmente; electrões secundários com energias maiores ou iguais a Δ são considerados electrões rápidos e são parte do espectro do electrão. Consequentemente, o espectro tem um limite de energia inferior de Δ e um limite de energia superior de T_0 , onde T_0 representa a energia cinética inicial do electrão.

A energia depositada é calculada como o produto do poder de paragem mássico de colisão restrito, L_Δ/ρ , e a fluência de electrões rápidos com electrões com energias entre Δ e T_0 . Estas duas componentes levam a :

$$\frac{D_m}{D^c} = \frac{\int_{\Delta}^{T_{max}} \Phi^\delta(T) [L_\Delta(T)/\rho]_m dT + \Phi^\delta(\Delta) [S(\Delta)/\rho]_{col}^m \Delta}{\int_{\Delta}^{T_{max}} \Phi^\delta(T) [L_\Delta(T)/\rho]_c dT + \Phi^\delta(\Delta) [S(\Delta)/\rho]_{col}^c \Delta} = \left(\frac{\bar{L}_\Delta}{\rho} \right)_c^m \quad (2.46)$$

onde Φ^δ é a fluência do electrão no meio incluído os raios- δ .

3 Simulação Monte Carlo

3.1 Introdução

O Método de simulação de Monte Carlo é um algoritmo computacional que se baseia na amostragem aleatória repetitiva para o cálculo de resultados. Estes métodos são geralmente usados para simular sistemas físicos e matemáticos e tendem a ser utilizados quando é inexecutável ou impossível calcular um resultado exacto com um algoritmo determinista.

O termo Monte Carlo foi atribuído na década de 1940 por físicos que trabalhavam em projectos de armas nucleares no *Los Alamos National Laboratory*.

3.1.1 História

O nome "Monte Carlo" foi popularizado pelos físicos Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John von Neumann e Nicholas Metropolis, entre outros e o nome é uma referência ao famoso casino do Mónaco onde o tio de Ulam jogava.

O uso da natureza aleatória e repetitiva do processo são análogos a actividade conduzida num casino.

Os métodos aleatórios de experimentação e de computação começaram com os primeiros pioneiros da teoria das probabilidades (por exemplo, a agulha de Buffon [WikBuf], e no trabalho em pequenas amostras por William Gosset [WikStu]), mas são mais específicos da época da computação pré-electrónica.

A primeira aplicação famosa deste método deve-se provavelmente a Enrico Fermi, em 1930, quando ele utilizou um método de amostragem para calcular as propriedades do neutrão.

Na década de 1950 estes métodos foram usados em *Los Alamos* para o início dos trabalhos relativos ao desenvolvimento da bomba de hidrogénio, e tornaram-se populares nos campos da física, físico-química, e das operações de investigação.

O uso destes métodos exigem grandes número de eventos, e foi a sua utilização que impulsionou o desenvolvimento de geradores de números pseudo-

aleatórios, cuja utilização é muito mais rápida do que o uso de tabelas de números aleatórios que tinham sido anteriormente utilizados para a amostragem estatística.

3.1.2 Aplicações e áreas de aplicação

Os métodos de simulação Monte Carlo são úteis especialmente para o estudo de sistemas com um número de graus de liberdade elevado.

As áreas de aplicação incluem [WikMC]:

- Modelação de transporte de luz em tecidos biológicos;
- Análise de risco (em sistemas financeiros);
- Análise de estruturas proteicas;
- Investigação de dispositivos semicondutores;
- Ciência ambiental, que tratam do comportamento de contaminantes;
- Física estatística, em particular o uso do método de Monte Carlo de modelação molecular computacional como uma alternativa para a dinâmica molecular.
- Em química-física, em especial para as simulações envolvendo núcleos atómicos
- Em computação:
 - Algoritmo de Las Vegas
 - LURCH
 - Computer Go
- Em física de partículas, para o desenvolvimento de detectores, compreensão do seu comportamento e comparação de dados experimentais com a teoria

Há vários códigos que usam métodos de Monte Carlo em física nuclear e partículas para fazer transporte de radiação:

- BEAMnrc – Código Monte Carlo para modelação de fontes para radioterapia;
- EGS – Código de simulação para transporte de electrões e fotões;
- GEANT – Simulação da interacção de partículas de alta energia;
- MCNP(X) – Simulação de transporte de radiação desenvolvido por LANL;

- PENELOPE - Monte Carlo para transporte de fótons e electrões;

3.1.3 Monte Carlo e números aleatórios

Curiosamente, os métodos de simulação Monte Carlo geralmente não requerem verdadeiros números aleatórios para serem úteis. Muitas das técnicas mais úteis usam sequências deterministas ou sequências pseudo-aleatórias, tornando-se mais fácil testar e executar de novo as simulações. A única qualidade normalmente necessária para fazer as simulações é uma boa sequência de números pseudo-aleatórios de forma a parecer "suficientemente aleatória" para a aplicação em questão. Esta simplificação depende da aplicação, mas normalmente os valores devem passar a uma série de testes estatísticos. Como exemplos de testes temos a verificação da distribuição – se estão distribuídos uniformemente ou seguem outra distribuição pretendida – quando um número suficiente de elementos da sequência são considerados.

3.1.4 Monte Carlo de transporte de radiação

A simulação MC de transporte de radiação pode-se dividir em:

- transporte de fótons e acoplamento fóton-electrão;
- transporte de partículas carregadas;
- transporte de neutrões, que não vai ser explorado neste capítulo.

O transporte de electrões e fótons pode ser descrito em vários passos e cada tipo de partículas tem, como descrito anteriormente, interacções diferentes.

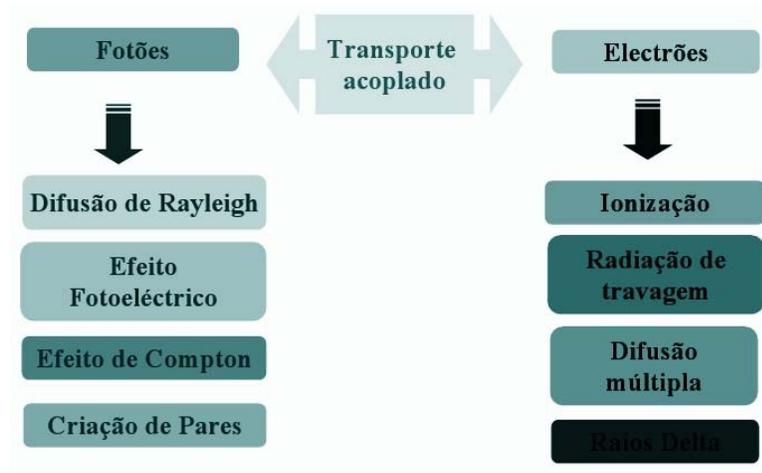


Figura 3.1 – Esquema das várias interacções para fotões e electrões [Per08].

No transporte de fotões têm de se ter em conta:

- que os fotões são propagados em linha recta entre colisões;
- os comprimentos de interacção são relativamente elevados;
- é possível a simulação de todas as interacções isoladas.

Em geral o transporte MC de fotões pode ser feito em 4 passos: [Kaw01, Sal06, Wil88]

1. escolha aleatória da distância à próxima interacção, de acordo com a secção eficaz total de interacção do fotão. A distância à próxima interacção é escolhida aleatoriamente a partir da lei de atenuação exponencial, i. e., a distância t , à próxima interacção obtém-se por

$$p(t) dt = \mu e^{-\mu t} dt \quad (3.1)$$

onde μ é o coeficiente de atenuação linear;

2. transporte para o local de interacção, tendo em conta os constrangimentos geométricos;
3. escolha aleatória do mecanismo de interacção, de acordo com a secção eficaz total do fotão. A escolha do mecanismo de interacção é baseado na intensidade relativa da secção eficaz do fotão dos processos que estão a competir, i. e., é gerado um número aleatório e o mecanismo de interacção

- é escolhido de acordo com a sua probabilidade, normalizado à unidade;
4. A escolha aleatória do resultado da interacção, em termos do ângulo de dispersão e da energia, de acordo com a secção eficaz diferencial do fóton que corresponde ao mecanismo de interacção previamente escolhido, é seleccionado aleatoriamente para o ângulo de dispersão dado. A energia é obtida da relação energia-ângulo de dispersão.

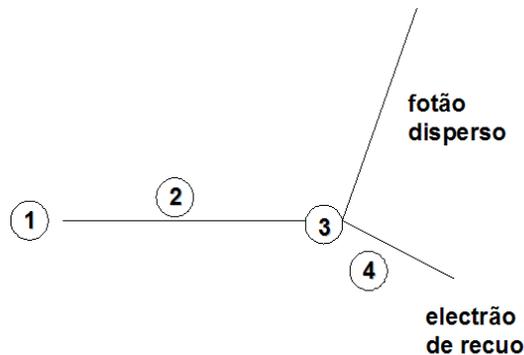


Figura 3.2 – Representação esquemática do transporte Monte Carlo de fótons. A dispersão de Compton foi o mecanismo de interacção escolhida e o resultado da interacção é um fóton disperso e um electrão ejectado.

Na simulação de electrões tem que se ter em conta factores diferentes do que no caso da simulação de fótons, tais como,

- secção eficaz de interacção elevada;
- grande número de interacções por unidade de comprimento;
- impossibilidade de simular todas as interacções.

A simulação MC de electrões pode também ser feita em 4 passos [Kaw01, Sal06], que está ilustrada na figura 3.3:

1. escolha aleatória da distância à próxima interacção catastrófica;
2. transporte até ao local da interacção, tendo em consideração os constrangimentos geométricos, perda de energia e deflexões devidas à dispersão elástica;
3. escolha aleatória do mecanismo de interacção;
4. escolha aleatória da saída da interacção, em termos de ângulo de

dispersão e energia, de acordo com a secção eficaz diferencial correspondente.

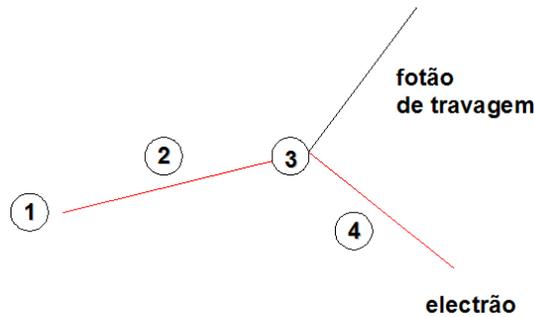


Figura 3.3 – Representação esquemática do transporte MC de electrões. A produção de radiação de travagem foi o mecanismo escolhido e a saída da interacção é um fóton de bremsstrahlung e um electrão.

3.2 PENELOPE

3.2.1 Introdução

O código de Monte Carlo PENELOPE foi desenvolvido por Francesco Salvat, José M. Fernández-Varea, Eduardo Acosta and Josep Sempau, que pertencem à Universidade de Barcelona.

O código PENELOPE realiza a simulação Monte Carlo do transporte de electrões e fótons em materiais arbitrários e numa ampla gama de energias, a partir de algumas centenas de eV até cerca de 1 GeV. O transporte de fótons é simulado usando um esquema padrão de simulação detalhado. A história dos electrões e dos fótons é vista como uma sequência aleatória de voos livres que acaba com um evento com interacção onde a partícula muda a sua direcção de movimento, perde energia e, ocasionalmente, produz partículas secundárias. O pacote de geometria deste código chama-se PENGEOm e permite a geração aleatória de jactos em volumes homogéneos limitados por superfícies quadráticas, isto é, planos, esferas, cilindros, etc.

Este código teve a sua primeira versão em 1996 e posteriormente teve uma versão em 2001 e 2006.

3.2.2 Transporte de radiação

O código de Monte Carlo PENELOPE permite a simulação dos seguintes processos físicos:

- Dispersão de Rayleigh;
- Dispersão de Compton;
- Absorção fotoelétrica de fótons;
- Relaxamento de átomos excitados, através da emissão de raios-X característicos e de electrões Auger, após a criação de vagas criadas pela absorção fotoelétrica e dispersão de Compton;
- Dispersão inelástica de electrões com electrões atómicos;
- Emissão de *bremsstrahlung*;
- Dispersão elástica de electrões por electrões atómicos e núcleos;

3.2.3 Estrutura

A figura 3.4 mostra um diagrama esquemático do funcionamento do código PENELOPE. A partir do programa MAIN, a geometria e a evolução do movimento das partículas é controlado e são contabilizadas as quantidades relevantes. O PENELOPE é inicializado através da chamada da rotina PEINIT, a qual lê o ficheiro com os dados do material, avalia as propriedades de dispersão e prepara tabelas de quantidades que dependem da energia que é usada durante a simulação. O estado inicial para partícula primária é então especificado, i.e. carga, energia, posição e cosenos directores, assim como a região e material onde a partícula se move.

Após esta inicialização, o programa entra no ciclo principal em que vai gerar uma a uma todas as partículas iniciais.

A rotina CLEANS inicia a parte dos secundários. A rotina START verifica se a energia da partícula está no intervalo esperado, se a partícula for um electrão ou um positrão, e de seguida força o evento seguinte a ser um evento onde a colisão tem uma perda de energia e uma deflexão angular mais pequenas do que os valores de limite dados. Esta rotina deverá ser chamada antes do início de um movimento da partícula ou quando esta atravessa uma fronteira. A rotina JUMP determina o comprimento, DS , do segmento do trajecto do evento seguinte. Se a

trajectória não atravessa uma fronteira, ou seja, a partícula permanece no mesmo volume, é dado um passo na direcção da trajectória da partícula e a rotina KNOCK é então chamada. A rotina KNOCK escolhe o tipo de interacção, contabiliza uma nova energia e direcção do movimento e guarda os estados iniciais das partículas secundárias geradas se as houver. [Pen03]

Se a partícula atravessa uma fronteira, esta é colocada na posição onde intersecta a fronteira e é devidamente ajustado o passo DS . No PENELOPE, o seguimento das partículas ao longo da geometria pode ser realizada com PENGEOM, um pacote de geometria combinatória, que permite a construção de corpos (ou regiões) limitada por superfícies quadráticas. Finalmente, a rotina SECPAR define o estado inicial das partículas secundárias e remove-as da contabilização de secundários. O valor de saída da rotina é o número de partículas secundárias que ainda se encontram contabilizadas no momento em que a rotina é chamada [Sal06].

das partículas no sistema material. Elas devem determinar o meio activo, alterá-lo quando a partícula atravessa uma fronteira, e, para certos algoritmos simulação, eles devem também manter o controlo da proximidade das fronteiras.

Com o pacote de rotinas PENGEOM, a descrição das travessias das fronteiras é muito simples: quando a partícula atinge uma fronteira, o seu percurso é interrompido logo após entrar num novo volume e recomeça no novo meio. Este método é aplicável mesmo quando temos o mesmo meio de ambos os lados da superfície. Isto é, a simulação detalhada com um único volume homogéneo, mesmo que este esteja dividido em duas partes por uma superfície arbitrária produzirá os mesmos resultados.

No PENELOPE, a simulação detalhada só é viável para transporte de fotões e electrões de baixa energia. Para os electrões de alta energia e positrões, a maior parte dos códigos Monte Carlo [por exemplo: *etran* [Ber88], *its3* [Hal92], *egs4* [Nel85], *egsnrc* [Kaw00], *Geant3* [Bru86], recorre à simulação condensada (classe I) ou mista (classe II), onde o efeito global de múltiplas interacções ao longo de uma trajectória de um determinado comprimento é avaliada utilizando as diversas teorias de dispersão disponíveis.

Para evitar passos com um grande comprimento, que poderiam colocar a partícula dentro de um meio diferente, este procedimento condensado exige a avaliação da distância a partir da posição actual, com a aproximação de fronteira, uma operação com um alto custo computacional.

A simulação mista aplicada no PENELOPE é, no mínimo, computacionalmente análoga à simulação detalhada. Na verdade, a estrutura do algoritmo de seguimento do PENELOPE foi desenhado para minimizar a influência da geometria sobre o transporte físico.

Este algoritmo opera independentemente da proximidade às fronteiras e só requer conhecimento do material na posição actual da partícula. Uma vez que no PENGEOM não são avaliadas a distância mais próxima à fronteira, este pacote não pode ser utilizado com códigos de simulação condensada, tais como os mencionados anteriormente.

A simulação do transporte de fotões de alta energia em geometrias complexas pode ser tratada por meio de métodos relativamente simples, que não exigem

controle da cruzamentos de fronteiras pois, para estes fotões, o tipo de material não interessa – os materiais tornam-se impermeáveis. Infelizmente, técnicas semelhantes não são aplicáveis ao transporte de electrões e positrões, pois essas partículas têm passos muito mais pequenos e, conseqüentemente, o processo de transporte é fortemente influenciado pela homogeneidade do meio.

A rotina PENGEOM permite descrever sistemas materiais homogéneos (cada volume tem de ser homogéneo), constituído por corpos limitados por superfícies quadráticas. Para acelerar as operações de geometria, os corpos do sistema de materiais podem ser agrupados em módulos, e módulos podem, por sua vez, fazer parte de grandes módulos, e assim por diante. Esta estrutura hierárquica modular permite uma redução do trabalho das rotinas de geometria, que se torna mais efectiva quando a complexidade do sistema aumenta.

Excepto para casos triviais, a fiabilidade da definição da geometria é difícil de verificar e, além disso, estruturas 3D com corpos interpenetrantes são difíceis de visualizar. Um par de programas, foram escritos para mostrar a geometria na ecrã do computador. Estes programas usam *software* específico de computação gráfica e, por isso, não são portáteis. Os executáveis estão incluídos no pacote PENELOPE e chamam-se GVIEW2D, GVIEW3D e GVIEWC.

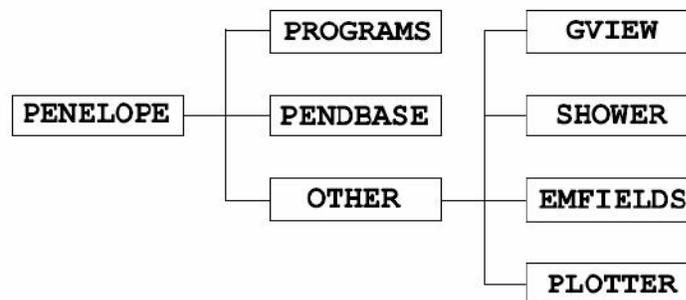


Figura 3.5 – Esquema geral do PENELOPE

3.2.3.1 Rotação e translação

Os objectos físicos podem encontrar-se com orientações espaciais arbitrárias pelo que a definição geométrica de vários volumes podem envolver rotações e

translações.

Translação é o movimento que um objecto realiza de um ponto a outro, sem que haja uma rotação ou distorção. Nessas transformações o referencial mantém-se fixo e apenas os vectores são transladados ou rodados.

A translação $T(t)$, defini-se pelo movimento do vector $\vec{t}=(t_x, t_y, t_z)$ que transforma o vector $\vec{r}=(x, y, z)$ em

$$T \vec{r} = \vec{r} + \vec{t} \quad (3.1)$$

Evidentemente a translação inversa, T^{-1} corresponde ao movimento do vector $-\vec{t}$, i.e., $T^{-1}(\vec{t})=T(-\vec{t})$.

A rotação pode definir-se como o movimento de um objecto ou sistema de coordenadas por um ângulo sobre um eixo fixo. O teorema de rotação de Euler afirma que uma rotação arbitrária podem ser parametrizada utilizando três parâmetros. Esses parâmetros são denominados por ângulos Euler. As rotações podem ser implementadas utilizando as matrizes de rotação, nas quais estão usados os ângulos de Euler.

A rotação R é definida pelos ângulos de Euler ω , θ e φ , os quais estão definidas da seguinte forma:

- primeiro realiza-se a rotação do ângulo ω em torno do eixo dos z , $R_z(\omega)$;
- em seguida realiza-se uma rotação em θ , em torno do eixo dos y , $R_y(\theta)$;
- finalmente realiza-se uma rotação de φ em torno do eixo dos z , $R_z(\varphi)$.

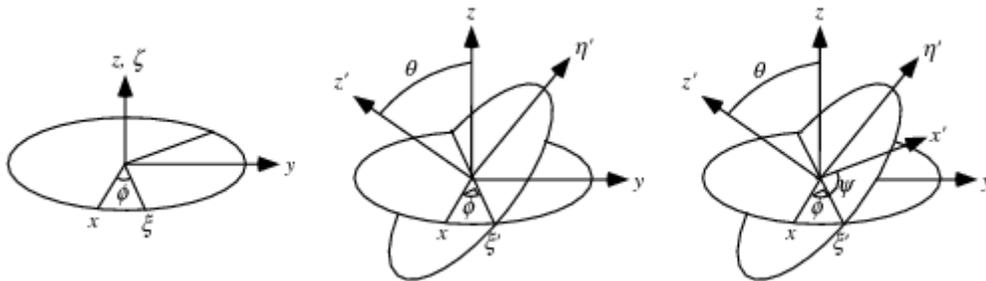


Figura 3.6 – Esquema da rotação dos ângulos de Euler [Math].

A rotação $R(\omega, \theta, \phi)$ transforma o vector $\vec{r}=(x, y, z)$ no vector

$$\vec{r}' = R(\omega, \theta, \phi)\vec{r} \quad (3.2)$$

cujas coordenadas são dadas por

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(\omega, \theta, \phi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

onde

$$R(\omega, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} R_{xx} & R_{xy} & R_{xz} \\ R_{yx} & R_{yy} & R_{yz} \\ R_{zx} & R_{zy} & R_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

é a matriz de rotação. Para obter na forma explicita temos as matrizes de rotação em torno de z e y.

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Como,

$$R(\omega, \theta, \phi) = R_z(\omega)R_y(\theta)R_z(\phi) \quad (3.6)$$

então,

$$R(\omega, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega & -\sin \omega & 0 \\ \sin \omega & \cos \omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

e finalmente

$$R(\omega, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \theta \cos \omega - \sin \phi \sin \omega & -\cos \phi \cos \theta \sin \omega - \sin \phi \cos \omega & \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \cos \theta \cos \omega + \cos \phi \cos \omega & -\sin \phi \cos \theta \sin \omega + \cos \phi \cos \omega & \sin \phi \sin \theta \\ -\sin \theta \cos \omega & \sin \theta \sin \omega & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

A rotação inversa a $R(\omega, \theta, \phi)$ é dada por $R(-\omega, -\theta, -\phi)$ e obtida a partir da matriz transposta pois temos:

$$R^{-1}(\omega, \theta, \phi) = R(-\omega, -\theta, -\phi) = R_z(-\omega) R_y(-\theta) R_x(-\phi) = R^T(\omega, \theta, \phi) \quad (3.9)$$

3.2.3.2 Superfícies quadráticas

No programa PENGINEOM é assumido que todas as superfícies limitadoras são quadráticas dadas pela equação implícita

$$F(x, y, z) = A_{xx}x^2 + A_{xy}xy + A_{xz}xz + A_{yy}y^2 + A_{yz}yz + A_{zz}z^2 + A_x x + A_y y + A_z z + A_0 = 0 \quad (3.10)$$

Esta forma inclui planos, esferas, cilindros, cones, etc. Para facilitar a definição das geometrias, cada superfície quadrática pode ser especificada pela sua equação específica da sua forma reduzida. A forma reduzida é dada pela expressão

$$F_r(x, y, z) = I_1 x^2 + I_2 y^2 + I_3 z^2 + I_4 z + I_5 = 0 \quad (3.11)$$

onde os índices I_1 a I_5 podem tomar os valores de -1, 0 ou 1.

Uma forma quadrática geral obtém-se da correspondência entre a forma reduzida e a aplicação das transformações seguintes:

1. Uma expansão ao longo dos eixos dada pelos factores de escala a, b, c. A equação da quadrática escalada é

$$F_s(x, y, z) = I_1 \left(\frac{x}{a}\right)^2 + I_2 \left(\frac{y}{b}\right)^2 + I_3 \left(\frac{z}{c}\right)^2 + I_4 \frac{z}{c} + I_5 = 0 \quad (3.12)$$

2. A rotação $R(\omega, \theta, \phi)$ é definida pelos ângulos de Euler ω , θ e ϕ . Note-se que a rotação $R(\omega, \theta, \phi)$ transforma um plano perpendicular ao eixo dos z num plano perpendicular à direcção com um ângulo polar θ e azimutal ϕ . O primeiro ângulo de Euler, ω não tem qualquer efeito quando a quadrática é simétrica em relação ao eixo dos z .
3. A translação é feita pelas componentes do vector t (t_x, t_y, t_z).

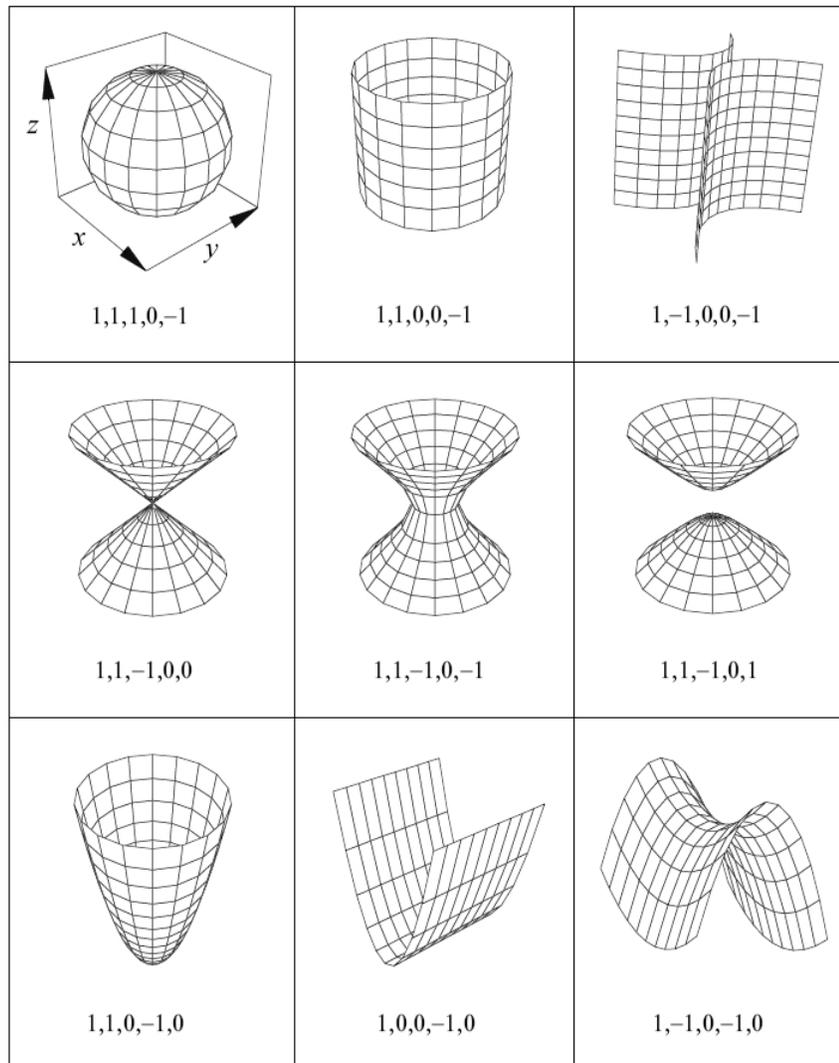


Figura 3.7– Quadráticas não planares reduzidas e os seus índices. Em todos os casos, a perspectiva é a mesma que para a esfera [Sal06].

A quadrática é completamente especificada pelos índices (l_1, l_2, l_3, l_4, l_5), os factores de escala (a, b, c), os ângulos de Euler (ω, θ, φ) e o vector do deslocamento (t_x, t_y, t_z). A equação implícita para obter uma quadrática passa por usar a matriz

$$A = \begin{pmatrix} A_{xx} & \frac{1}{2}A_{xy} & \frac{1}{2}A_{xz} \\ \frac{1}{2}A_{yx} & A_{yy} & \frac{1}{2}A_{yz} \\ \frac{1}{2}A_{zx} & \frac{1}{2}A_{zy} & A_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

e a equação genérica das quadráticas fica com a forma

$$\vec{r}^T A \vec{r} + A^T \vec{r} + A^0 = 0 \quad (3.14)$$

onde r e $A \equiv (A_x; A_y; A_z)$ são matrizes de uma coluna. Note-se que a matriz A é simétrica ($A^T = A$).

3.2.3.3 Construção de uma geometria quadrática

Um corpo é um volume limitado por uma superfície quádricas e cheio por um meio material. Para especificar um corpo temos de definir as superfícies quadráticas limitantes $F(r)=0$, com os apontadores correspondentes (+1 ou -1), e a sua composição. É considerado que os volumes são definidos de modo hierárquico, como mostra a figura 3.4. [Sal06]

O pacote PENGEOM contém uma subrotina, chamada LOCATE, que localiza um ponto r , ou seja, determina o corpo que o contém. Uma segunda subrotina, chamada STEP, move a partícula por um distância d , a partir de uma posição r_0 e distância s , dentro de um dado corpo. A rotina STEP verifica ainda se a partícula sai do meio material, e quando isso acontece, pára a partícula logo depois a entrada desta no novo meio material. Para isso, temos de determinar as intersecções do percurso da partícula com todas as superfícies que limitam o corpo, e verifique se a posição final ainda se encontra no mesmo corpo. A razão

para utilizar apenas superfícies quadráticas é que estas intersecções são facilmente calculadas resolvendo uma equação quadrática [Sal06].

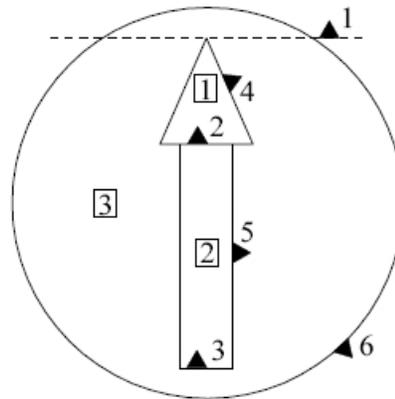


Figura 3.8 – Exemplo de uma simples construção geométrica. Cada número corresponde a um corpo [Sal06].

Note-se que os corpos podem ser côncavos, ou seja, o segmento de recta que une quaisquer dois pontos num corpo pode não estar inteiramente contido no corpo. Contudo, mesmo quando a posição final da partícula se encontra dentro do volume inicial, tem de se analisar todas as intersecções no segmento, que corresponde ao caminho da partícula, com os limites da superfície e verificar se a partícula deixou o volume depois de qualquer das intersecções. Quando a partícula sai do volume inicial, depois de viajar uma dada distância, tem de se localizar r_0 . O método mais simples consiste na computação dos apontadores laterais de todas as superfícies do sistema em r_0 e determinar o volume que contém esse ponto analisando os ponteiros laterais dos diferentes corpos numa ordem crescente. É claro que, para geometrias complexas, este é um processo muito lento. Pode-se aumentar a velocidade simplesmente ignorando os elementos do sistema que não podem ser alcançados num único passo. Infelizmente, como um corpo pode ser limitado por todos os outros corpos que tenham sido definidos anteriormente, o algoritmo pode ser melhorado apenas à custa de lhe serem fornecidas informações adicionais [Sal06].

Um módulo consiste num conjunto de volumes, limitados por uma superfície

quadrática, que contém um ou vários corpos. Um módulo pode conter outros módulos, que serão designados por sub-módulos. Um corpo que está ligado e limitado por superfícies só pode ser declarado como um corpo ou como um módulo. Para simplificar, módulos são obrigados a preencher as seguintes condições [Sal06]:

1. os corpos e sub-módulos de um módulo devem estar totalmente contidos dentro do módulo-mãe;
2. um sub-módulo de um módulo não se pode sobrepor a outro corpo do mesmo módulo. Isto é necessário para se certificar de que uma partícula só pode entrar ou sair de um módulo através das superfícies que o limitam.

Um módulo pode representar uma parte rígida (por exemplo, uma fonte radioactiva, a cabeça de um acelerador, um detector, um fantasma, etc) de um sistema mais complexo. Para facilitar a definição da geometria, é permitida a translação e rotações de cada um dos módulos. O definição de um módulo inclui os parâmetros de uma *rotação* $R(\omega, \theta, \phi)$ e uma *translação* $T(t)$, que são opcionais e servem para modificar a posição e orientação do módulo em relação ao referencial do laboratório.

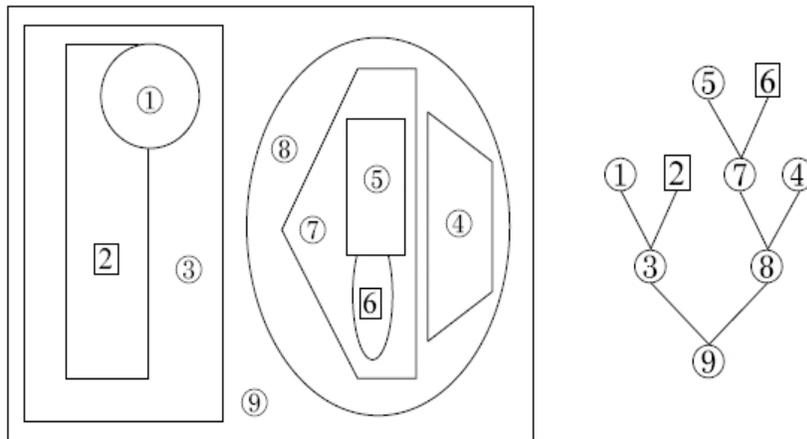


Figura 3.8– Exemplo de uma geometria associado a um esquema em árvore que explica a ordem de aproximação à geometria [Sal06].

4 Ulysses

O pacote Ulysses é um novo pacote de geometria, que permite o seguimento de partículas num conjunto complexo de volumes. Este pacote está dividido em duas bibliotecas: a biblioteca onde estão as rotinas de geometria e a biblioteca de histogramação. As rotinas da biblioteca de geometria estão agrupadas no ficheiro *ullib*, à excepção das rotinas de definição da geometria – *ulgeo* – e da rotina de definição da fonte – *ulsource*. Estas rotinas deverão ser construídas pelo utilizador, sendo que é fornecido apenas o seu esqueleto. As rotinas da biblioteca de histogramação estão agrupadas no ficheiro *ulhistos*. O módulo de rotinas do utilizador inclui as rotinas de geometria e definições da fonte de radiação. Os parâmetros de entrada necessários para o PENELOPE são definidos no programa principal. No Ulysses a estrutura da geometria é similar à usada nos códigos *Geant3* e *Geant4*: existe um conjunto pré-definido de volumes, os quais podem ser associados em corpos complexos [Gea95].

A simulação do transporte de radiação em sistemas materiais envolve dois tipos diferentes de tarefas: uma diz respeito aos processos físicos e os outros ao seguimento de uma partícula ao longo da geometria. A primeira tarefa, que envolve, entre outras coisas, a determinação do passo entre interações, pode ser realizado através de um código como o PENELOPE, enquanto que a segunda tarefa relativa ao disposição espacial, cruzamento de fronteiras, etc, é a finalidade para a qual foi criado o Ulysses. Do ponto de vista da optimização esta é uma parte importante do programa, pois para geometrias complexas, o seguimento de partículas pode corresponder a uma grande porção do tempo de simulação [Sal06].

O sistema de seguimento de partículas e de geometria do Ulysses é bastante diferente do implementado no PENELOPE. Enquanto no PENELOPE se definem os corpos materiais usando superfícies quadráticas o Ulysses tem volumes pré-definidos que são utilizados para construir os corpos. Trata-se de uma abordagem mais intuitiva para o problema e que é usado por exemplo nos códigos da família GEANT. A declaração da geometria é feita através da rotina *ulgeo* que exige alguma codificação em *fortran*. Isto pode ser considerado como uma

desvantagem mas acrescenta flexibilidade ao programa. O pacote contém já vários exemplos de geometria e fontes de radiação, que são fornecidos ao utilizador.

O pacote de histogramação *ulhistos*, fornece um grande número operações sobre histogramas. Esta biblioteca de rotinas pode ser usada de forma autónoma em outros programas.

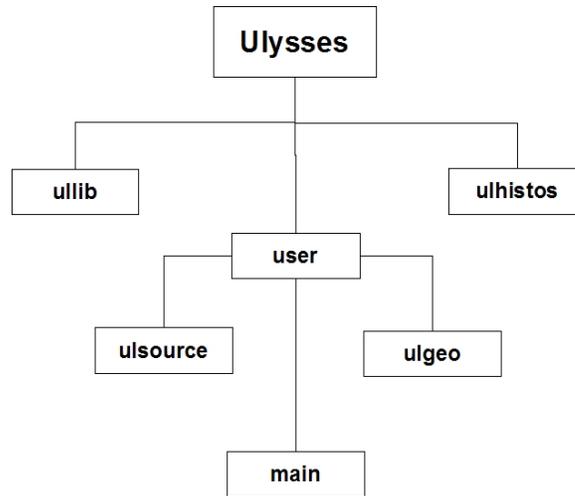


Figura 4.1 – Diagrama de relação dos pacotes de constituem o programa Ulysses.

4.1 Rotinas do utilizador

As rotinas do utilizador do Ulysses são constituídos por 3 partes – o programa principal (*main*), definição da geometria (*ulgeo*) e a definição da fonte e partícula primária (*ulsource*). O programa principal pode ser adaptado pelo utilizador de modo a que este possa efectuar a simulação desejada. Tal como este programa as outras duas rotinas também deverão ser modificadas para satisfazer as condições pretendidas pelo utilizador.

4.1.1 O programa main

Na implementação Ulysses do PENELOPE a simulação é controlada por uma rotina principal (*main.f*) onde é feita a chamada das rotinas do PENELOPE e *Ulysses*. O ciclo sobre as partículas primárias e secundárias é feito neste programa assim como a contabilização e a histogramação das grandezas físicas.

Todos os parâmetros necessários ao PENELOPE são fornecidos aqui. O programa *main* inclui a chamada de duas rotinas importantes: *ulgeo*, para a definição de geometria e *ulsource* para a definição da fonte, como já foi referido.

As variáveis comuns a todas as rotinas do Ulysses estão feitas numa declaração comum, a qual está num ficheiro de inclusão *ulincl.inc*. O utilizador de um modo geral não necessita de aceder a este ficheiro.

O programa *main* faz a ligação dos dados da simulação das rotinas do Ulysses e do PENELOPE. As variáveis de entrada e saída do Ulysses estão directamente relacionadas com as variáveis usadas no PENELOPE (mesmo uso e propósito).

Ao contrário das implementações com o PENELOPE padrão, vários parâmetros de entrada são definidos no corpo da rotina *main*.

Ao contrário do PENELOPE, o Ulysses não necessita a inclusão de quaisquer variáveis em comum com o programa principal, e a comunicação com as rotinas é feita pela entrada/saída de variáveis nas chamadas às rotinas.

O diagrama da figura 4.2 resume o funcionamento do mecanismo dentro do programa *main*. O programa começa com a inicialização da histogramação e a inicialização de todas as variáveis PENELOPE seguido pela chamada da rotina de geometria *ulgeo* onde são estabelecidas as definições geométricas.

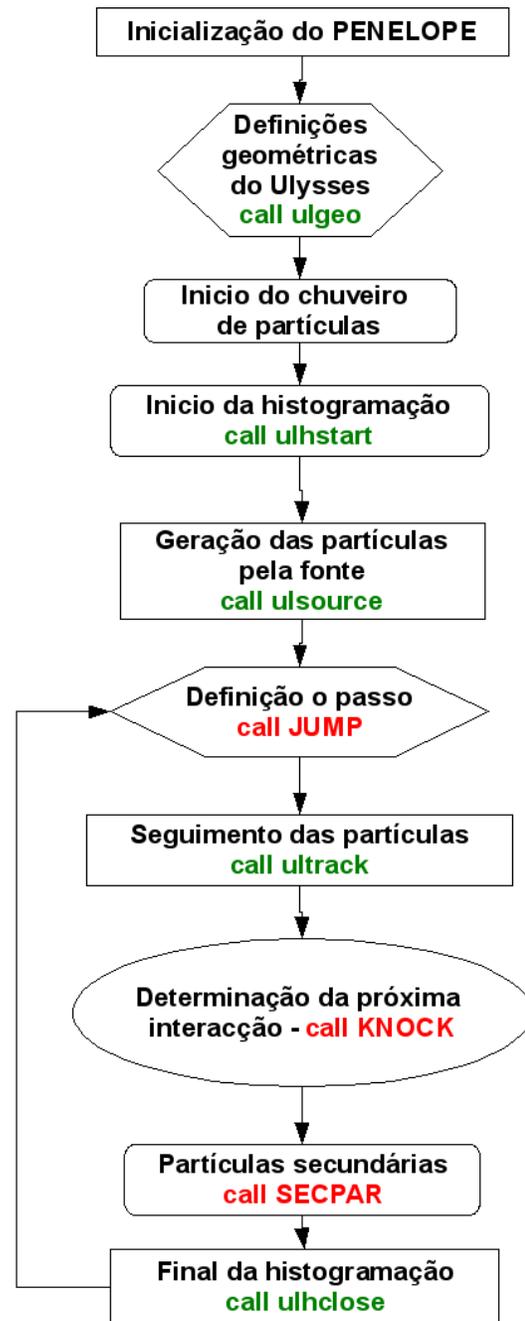


Figura 4.2 – Diagrama do programa *main*, na implementação PENELOPE+Ulysses.

Depois disso, vem o ciclo de geração de partículas primárias a qual é feito pela rotina *ulsource* do Ulysses.

Em seguida é executada a rotina JUMP do PENELOPE na qual é definido o passo dado pela partícula e, posteriormente, usando a rotina *ultrack*, se faz o seguimento da partícula através da geometria.

A determinação do tipo de interação é então novamente feita pelo PENELOPE e são geradas as partículas secundárias. No final, toda a informação é guardada em histogramas.

4.1.2 Definição da geometria – *ulgeo*

Para se definir a geometria temos primeiro que definir os volumes num universo, atribuir-lhes um material, um número de identificação (ID), uma forma e tamanho. O ID do universo é obrigatoriamente 1 e o dos outros volumes tem de ser um valor inteiro maior que 1, sem ordem sequencial obrigatória.

Existe um conjunto de volumes pré-definidos e cada volume tem um número tipo atribuído de acordo com a sua forma. Todos estes volumes têm de estar contidos no universo.

Cada volume tem um volume mãe que o contém completamente, com excepção do universo. Assim um volume não pode ser partilhado por duas mães, e se na prática este caso surgir tem de se dividir o volume filho em dois completamente contidos em cada uma das mães. A relação mãe/filho é feita automaticamente pela rotina *ulchildinit*, pois esta rotina guarda a informação desta relação para cada volume.

Os volumes pode também ter vizinhos que podem ser definidos como tal, mas este não é um procedimento obrigatório.

A cada volume está associado o seu referencial próprio. Para volumes simétricos o centro deste referencial é o centro geométrico da figura enquanto para os restantes é em geral a sua base.

Um volume é definido por um conjunto de parâmetros (por exemplo altura, largura, etc.) característicos do tipo de volume, por um vector de translação do centro do seu referencial relativamente ao universo e, opcionalmente, por uma matriz de rotação.

Esta rotina chama 3 outras rotinas – *ulvolu*, *ulposi* e *ulneigh*.

4.1.3 Definição da fonte - *ulsource*

A fonte de radiação tem de ser definida dentro do programa e é esta que emite a partícula primária que vai ser seguida. No PENELOPE esta partícula pode ser um electrão, um fóton ou um positrão, e o utilizador tem de definir para além do tipo partícula, a posição inicial, a direcção e a energia cinética, o que possibilita muitas configurações de fontes.

Nesta rotina são definidas as características da fonte, posição inicial e partícula primária. O utilizador deverá definir a posição inicial (x, y, z) – em cm, os cosenos directores (u, v, w), a partícula primária (electrões, fótons ou positrões) e a energia da partícula primária – em eV.

4.2 Biblioteca de rotinas de geometria - *Ullib*

Ullib é um pacote que contém mais de 50 rotinas que podem ser divididas em 4 tipos: geometria (este grupo de rotinas definem os volumes que podem ser utilizados), mudança de coordenadas (este grupo de rotinas permite a translação e rotação de volumes), *tracking* e localização (este grupo de rotinas permite localizar e seguir uma partícula durante o seu movimento dentro de um volume) e rotinas auxiliares (este grupo de rotinas simplificam as rotinas principais de modo a poupar tempo de computação).

4.2.1 Geometria

O pacote de geometria tem duas funções principais, definição da geometria e seguimento das partículas dentro desta.

Há várias questões que se colocam no desenvolvimento de um pacote de geometria:

- Em que volume se encontra uma dada partícula?
- Qual a distância ao volume mais perto na trajectória da partícula?
- Qual a distância ao volume mais próximo?
- Será que após um passo o ponto ainda se encontra no volume?

No pacote *Ulysses* estão definidos vários volumes, a partir dos quais se podem construir corpos. Cada volume é identificado por um número de código (Tabela

4.1) estando estes números organizados de modo a que o primeiro algarismo identifica o volume, o segundo um sub-volume ou volume semelhante que se catalogou no mesmo grupo e finalmente o terceiro que indica a orientação espacial. Este método de organização e separação permite uma poupança de tempo de computação.

O sistema de geometrias usado pelo Ulysses permite a construção de estruturas bastante complexas pela adição ou subtracção de volumes. A organização de volumes é feita usando uma lógica mãe/filho/vizinho. Qualquer volume pode conter volumes filho e pode fazer uma fronteira com os volumes vizinhos.

Todos os volumes tem um volume mãe excepto o volume designado por universo, que inclui todos os volumes. A forma do volume *Universo* é escolhida pelo utilizador e as suas dimensões têm de ser suficientemente grandes para conter todos os volumes. Por definição o seu meio é o vácuo e todas as partículas que entram no volume universo são descartadas. Como consequência, a fonte de radiação não poderá ser colocada directamente dentro do universo, sendo necessário que esteja sempre dentro de um outro volume à escolha do utilizador. A mãe de cada volume tem de ser declarada na rotina *ulgeo* sendo a declaração de vizinhos de um volume opcional. A declaração destes é aconselhada pois aumenta a velocidade de *tracking*. Dentro da rotina *ulgeo* é chamada a rotina *ulnitchild* afim de criar a lista de filhos de um dado volume.

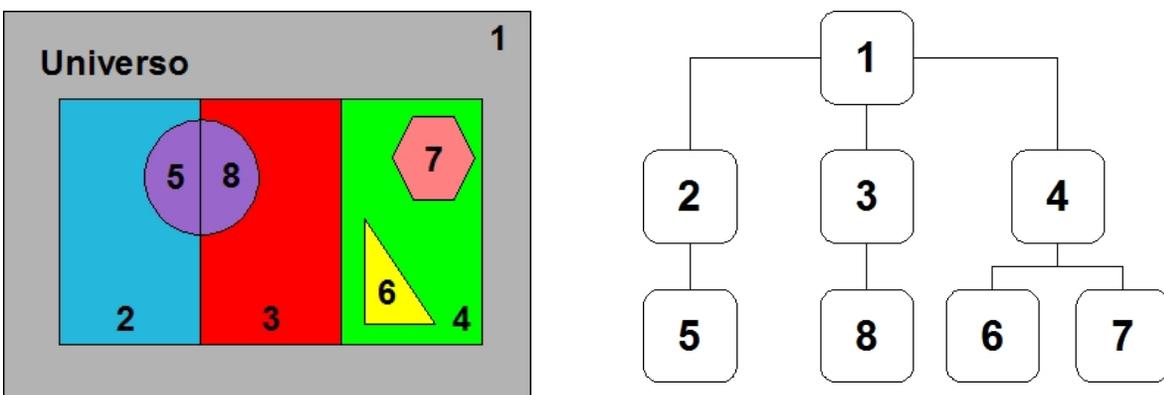
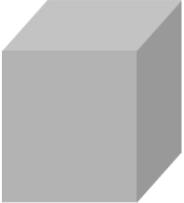
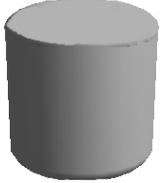
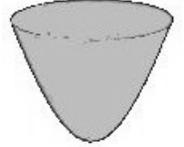
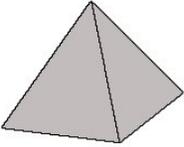
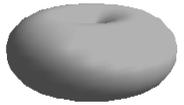


Figura 4.3 – Relação universo-mão-filha-vizinho.

Os volumes têm de estar completamente contidos no seu volume mãe. No caso de um volume *físico* ser partilhado entre dois volumes, o utilizador tem de o dividir de modo a que cada parte esteja contida nos volumes mãe respectivos.

Cada volume tem um referencial associado a si. O referencial absoluto é o do volume universo sendo os outros definidos em relação a este. O referencial de cada volume é definido de forma que o volume apresente algum tipo de simetria pelo menos em relação a um dos eixos. No caso de volumes cujo referencial próprio está rodado relativamente ao referencial do universo, são utilizados os ângulos de Euler para caracterizar a rotação. A tabela seguinte mostra os volumes básicos existentes no pacote. Há um grupo de rotinas que definem os volumes que se podem usar. A definição de volume inclui sempre as fronteiras do mesmo.

Rotina	Tipo	Definição	Figura
ulbox	100	Esta rotina define uma caixa (cubo ou paralelepípedo). O centro do volume da caixa é o centro do eixo de coordenadas, sendo que esta é definida por $-l_x/2 \leq x \leq l_x/2 \quad , \quad -l_y/2 \leq y \leq l_y/2 \quad , \quad -l_z/2 \leq z \leq l_z/2$ onde l_x, l_y, l_z são as arestas.	
ulcone	400	Esta rotina define um cone. A base do volume esta assente em xy e o centro do sistema de referência encontra-se no centro da base. O cone é definido por $0 \leq z \leq h$, $r_{min} = r_{max} \times (h - z) / h \quad , \quad x^2 + y^2 \leq r_{min}^2$ onde r_{max} é o raio da base e h é a altura.	
ulcyl	200	Esta rotina define um cilindro com base em xy . O centro do volume é o centro do eixo de coordenadas. O cilindro é dado por $x^2 + y^2 \leq r^2$, $-h_z/2 \leq z \leq h_z/2$ onde r é o raio da base e h_z é a altura do volume ao longo do eixo dos z .	
ulellips	710	O elipsóide é definido nesta rotina pelos seus eixo a, b e c como $\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 \leq 1$	

Rotina	Tipo	Definição	Figura
ulhsph	310	Esta rotina define meia esfera com base em xy . O centro da base do volume é o centro do eixo de coordenadas. O volume é dado por $x^2 + y^2 + z^2 \leq r^2$, $0 \leq z \leq r$ onde r é o raio da base.	
ulhyper	720	O hiperbolóide é definido por esta rotina pelos seus eixo a , b e c como $\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 - \left(\frac{z}{c}\right)^2 \leq 1$	
ulpara	700	O parabolóide é definido nesta rotina usando as suas constantes a e b como $\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 - z \leq 1$	
ulpyramid	500	Esta rotina define a pirâmide quadrangular. A base do volume está assente em xy e o centro desta é o centro do volume. A pirâmide é definida por $0 \leq z \leq h$, $r_{min} = r_{max} \times (h - z) / h$, $-l_{min} / 2 \leq x \leq l_{min} / 2$, $-l_{min} / 2 \leq y \leq l_{min} / 2$ onde r_{max} é o igual a meia aresta, r_{min} é a distância entre o eixo central da pirâmide e a face lateral a uma dada altura, l_{max} é a aresta da base e h é a altura.	
ulsph	300	Esta rotina define a esfera. O volume é dado por $x^2 + y^2 + z^2 \leq r^2$ onde r é o raio da esfera.	
ultorus	800	Esta rotina define um toro com base em xy . O centro da base do volume é o centro do eixo de coordenadas. Este volume é descrito por uma série de condições $a = r_{max} - r_{min}$, $r = a / 2$. O ângulo entre o eixo dos x e dos y é definido como $\cos \theta = x / \sqrt{x^2 + y^2}$, $\sin \theta = y / \sqrt{x^2 + y^2}$, $x_2^2 = x \cos \theta - y \sin \theta$ e $y_2^2 = x \sin \theta - y \cos \theta$ finalmente temos que $x^2 + y^2 \leq r^2$, $x_2^2 + z^2 \leq r^2$ e $y_2^2 + z^2 \leq r^2$.	

Rotina	Tipo	Definição	Figura
ultub	210	Esta rotina define um tubo com base em xy. O centro do volume é o centro do eixo de coordenadas. O tubo é dado por $r_{min} \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq r_{max}$, $-h_z/2 \leq z \leq h_z/2$ onde r_{min} é o raio interior da base e r_{max} é o raio externo da base e h_z é a altura do volume.	
ulwedge	600	Esta rotina define uma cunha com base em xy. O centro do volume é o centro do eixo da altura na extremidade onde x e y são zero. A cunha é dada por $P = -x_i/y_i \times x + y_i$, $0 < x \leq x_i$, $0 < y \leq y_i$, $0 < y \leq P$, $-h_z/2 \leq z \leq h_z/2$ onde h_z é altura do volume.	

Tabela 4.1 – Tipos de volumes básicos existentes e devidas definições.

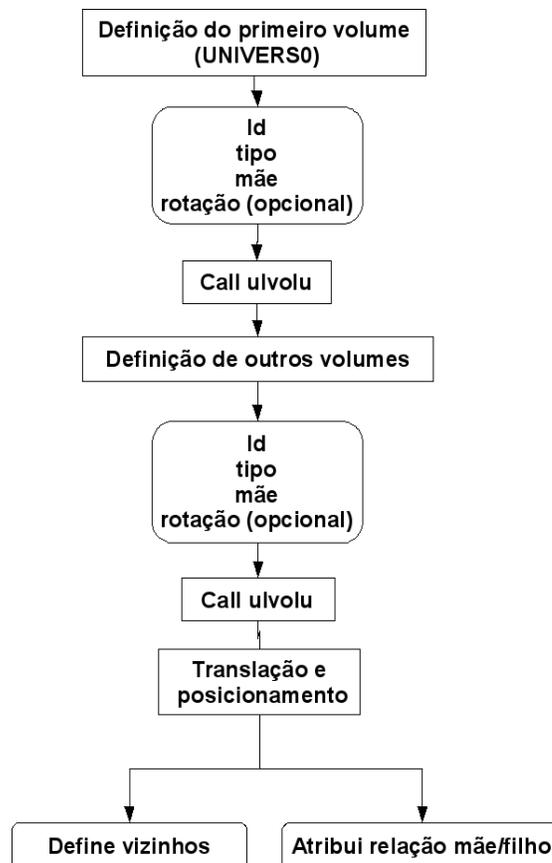


Figura 4.4 – Diagrama de fluxo da rotina ulgeo

A rotina *ulvolsearch* faz a ligação entre as rotinas dos volumes usando um número associado a cada volume (cada volume tem um valor numérico associado). Alguns volumes estão implementados em 3 direcções diferentes (cada um alinhado com um eixo coordenado) pois o seguimento e localização das partículas torna-se mais rápido em termos de computação. Nesta rotina o sistema de coordenadas é originalmente o próprio do volume sendo que este é transladado para o referencial do laboratório usando as rotinas *ultrans* e *ultrans_1*. A transformação de coordenadas é feita usando geralmente o centro de cada volume.

A organização de volumes é feita através do número que é atribuído a cada volume na rotina *ulgeo*. Esta rotina verifica identificação de volumes e relação entre eles mal feita, por exemplo, no caso de um volume estar dentro de outro.

4.2.2 Mudança de coordenadas

A rotina *ultrans* faz a translação do referencial principal (o do universo) para o referencial do volume. A matriz de translação pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} x_{out}(1) \\ x_{out}(2) \\ x_{out}(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i(1) \\ x_i(2) \\ x_i(3) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_c(1) \\ x_c(2) \\ x_c(3) \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

onde x_{out} e x_{in} são as coordenadas do volume e do universo e x_c são os pontos de referência do volume no referencial do universo.

A rotina *ultrans_1* faz a translação do referencial do volume para o referencial do principal (o do universo). A matriz de translação pode ser escrita como

$$\begin{bmatrix} x_{out}(1) \\ x_{out}(2) \\ x_{out}(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i(1) \\ x_i(2) \\ x_i(3) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_c(1) \\ x_c(2) \\ x_c(3) \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

onde x_{out} e x_{in} são as coordenadas do universo e do volume e x_c são os pontos de referência do universo no referencial do volume.

A rotina *ulrot* roda o volume usando os ângulos de Euler. Este processo pode ser descrito pela matriz seguinte

$$\begin{bmatrix} x_{out}(1) \\ x_{out}(2) \\ x_{out}(3) \end{bmatrix} = R(\omega, \theta, \phi) \times \begin{bmatrix} x_c(1) \\ x_c(2) \\ x_c(3) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

A rotina *ulrot_1* roda o volume usando a matriz transposta dos ângulos de Euler. Este processo pode ser descrito pela matriz seguinte

$$\begin{bmatrix} x_{out}(1) \\ x_{out}(2) \\ x_{out}(3) \end{bmatrix} = R^T(\omega, \theta, \phi) \times \begin{bmatrix} x_c(1) \\ x_c(2) \\ x_c(3) \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

4.2.3 Tracking e localização

As rotinas de localização e seguimento das partículas permitem seguir e encontrar uma partícula na sua trajetória. O seguimento das partículas é feito pela rotina *ultrack* e o funcionamento da rotina está esquematizada na figura seguinte.



Figura 4.5 – Diagrama de fluxo da rotina ultrack

Inicialmente o utilizador põe a fonte ou o feixe numa posição à sua escolha. A partícula emitida entra no volume e o sistema de seguimento procura-a após um passo, usando a rotina *ullocate*.

A localização da partícula num volume e o cálculo da distância à fronteira são efectuados por uma rotina diferente dependendo do tipo de volume onde se encontra a partícula. A selecção da rotina a usar é feita na rotina *uldvolvearch*. Se a partícula ainda se encontrar no mesmo volume a rotina de cálculo coloca-a na fronteira e obriga-a a dar outro passo. Caso contrário, é calculada a distância efectiva à fronteira usando a rotina *uldtoimpact* e considera-se a distância o passo efectivo.

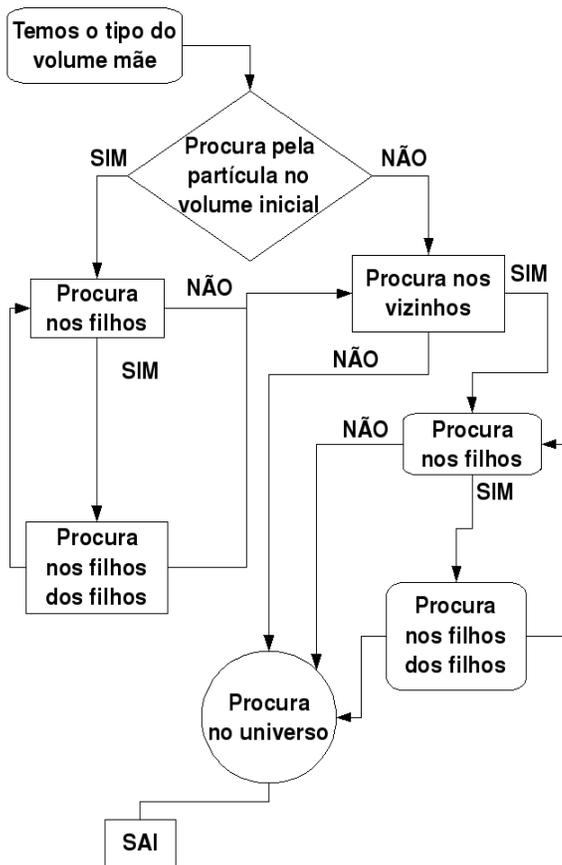


Figura 4.6 – Diagrama de fluxo da rotina ullocate

Um exemplo de uma rotina de localização e distância específica de um sólido é a rotina *uldbox* cujo funcionamento está esquematizado no diagrama abaixo.

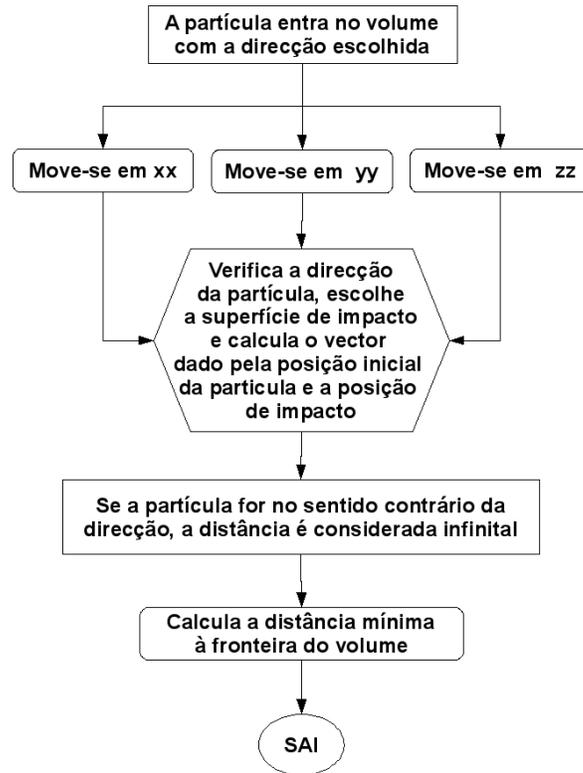


Figura 4.7 – Diagrama de fluxo da rotina uldbox

A rotina *uldvolsearch* faz a ligação entre o volume seleccionado pelo utilizador e a rotina correspondente para o cálculo da distância e ponto de impacto da partícula com o volume na direcção escolhida. Esta selecção é feita usando o número de identificação – *itype*.

A rotina *ullocate* permite saber onde está a partícula após um passo, se no volume inicial ou num novo volume, que pode ser um filho deste ou um vizinho.

Depois da identificação do volume inicial e após um passo o programa inicia a sua busca pela partícula. Inicialmente procura-a dentro do volume inicial e se esta se encontrar aí procura nos seus filhos e nos filhos dos filhos. Caso contrário procura nos vizinhos do volume inicial. Se a encontrar num dos vizinhos, procura nos seus filhos e por ai em diante.

Finalmente, se não encontrar a partícula faz uma busca geral em todos os volumes do sistema. Esta busca não é feita inicialmente pois leva muito mais tempo que a busca gradual, visto que faz uma procura volume a volume em todos os volumes declarados.

Para a localização de uma partícula é necessário saber o número de filhos do volume inicial, o número dos seus vizinhos, os seus números de identificação e as suas características. Essa informação dos filhos e vizinhos é guardada num vector por duas rotinas – *ulchild* e *ulneigh*. O primeiro valor de cada vector corresponde ao número de filhos ou vizinhos que um dado volume tem e os valores seguintes correspondem aos números de identificação de cada volume com uma destas relações.

Se a partícula não for encontrada no volume, independentemente de este ser simples ou complexo, é considerado que esta se encontra no *Universo* e por isso deixa de ser seguida.

A rotina *ultrack* permite o seguimento de uma partícula num volume complexo. Este seguimento é feito volume a volume.

Se tivermos uma partícula inicialmente num volume, após esta dar um passo, este programa procura onde esta se encontra e faz isso usando a rotina *ullocate*. Se a partícula ainda estiver no mesmo volume, a rotina coloca a partícula na fronteira usando para isso uma outra rotina *uldtoimpact* e considera a distância à fronteira o passo efectivo.

A rotina *ulfind* é uma rotina semelhante à *ullocate*. Esta rotina faz uma busca geral da partícula por todos os volumes, e não apenas dentro de um volume.

A rotina *uldtoimpact* permite saber o ponto de impacto e a distância mínima à fronteira na direcção de deslocamento da partícula. O ponto de impacto é calculado para cada volume usando o seu número de identificação na selecção do mesmo, na rotina *uldvolsearch*.

4.3 Pacote de histogramação - Ulistos

Este pacote permite fazer histogramação e foi inspirado no pacote HBOOK desenvolvido no CERN [Hbo93]. Além da histogramação base, este pacote permite algumas operações básicas entre histogramas e permite ao utilizador retirar informação do histograma.

4.3.1 Histogramação básica

Os histogramas são um tipo de gráficos onde os dados da entrada são

discretos, ou seja, os valores são agrupados em intervalos de valores. O eixo x é dividido num certo número de canais e cada um irá conter uma quantidade. A título de exemplo de uma histogramação básica de uma distribuição de frequência, consideremos o caso de um detector Geiger com o qual se pretende obter a distribuição de contagem durante um dado intervalo de tempo. Cada vez que uma contagem é obtida com o Geiger, um evento é adicionado no canal correspondente ao intervalo de tempo onde reside. Suponhamos que se efectuaram 10 aquisições com os valores 311, 325, 320, 331, 317, 322, 330, 315, 340, 328, e os canais do histograma tem a seguinte periodicidade 300-309, 310-319, 320-329, 330-339, 340-349. O histograma de frequências terá $c_1=0$, $c_2=3$, $c_3=4$, $c_4=2$, $c_5=1$ (c_N corresponde ao canal de índice N) e o histograma teria o aspecto da figura abaixo:

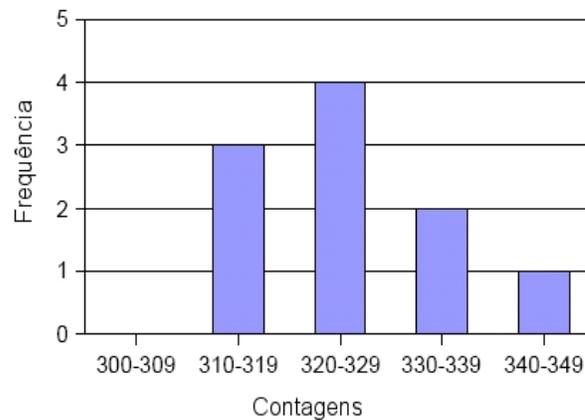


Figura 4.8 – Histograma com 10 entradas

4.3.2 Estrutura do pacote

Os histogramas a 1-d e a 2-d são guardados em duas regiões de memória partilhada – *common* – diferentes, *ulhistos1* e *ulhistos2*. O número de histogramas permitido por omissão é de 100 e 10 respectivamente. A cada histograma é dado um número de identificação *ID*. O número de *ID* dos histogramas pode contudo ser escolhido pelo utilizador num intervalo de 1 a 9999. O número máximo de canais para cada histograma é de 1000 e 100, respectivamente, para histogramas a 1 dimensão e 2 dimensões. Estes valores

podem ser modificados no ficheiro de inclusão de variáveis *ulhistos.inc*. O tamanho dos *commons* são aproximadamente iguais a $nh1d * nmax1d^2$ e $nh2d * nh2d * nmax2d^2$.

Seguindo o esquema do PENELOPE, cada histograma de saída é arquivado separadamente o que faz com que a saída seja bastante pesada do ponto de vista do espaço em disco.

4.3.3 Início do pacote de histogramação e descrição de rotinas

A primeira rotina a ser chamada pelo utilizador tem que ser a rotina *ulhstart*. Esta rotina inicia os valores da base de dados e inicia as unidades padrão de entrada e saída.

- Reserva de histogramas - Para usar um histograma, as suas características devem ser fornecidos pelo utilizador. É necessário definir os limites inferiores e superiores e o número de canais do histograma.
- Preenchimento de histogramas – A situação mais frequente numa simulação Monte Carlo é os histogramas serem preenchidos numa base evento a evento. Neste caso, a quantidade q passada por uma variável x que correspondente a um canal i será somada ao conteúdo do canal.

São considerados dois tipos distintos de histogramas.

1. O primeiro tipo de histogramas é chamado uma vez por evento mas a quantidade q pode tomar qualquer valor - histograma do tipo frequência. A incerteza no conteúdo de cada canal é simplesmente a raiz quadrada do seu valor.
2. O segundo tipo de histogramas é preenchido várias vezes por evento – histograma do tipo média. Neste caso o utilizador está interessado num valor médio do conteúdo do canal sobre um dado número de eventos N_{ev} . Como exemplo tome-se a energia depositada por um feixe de partículas num meio em função da profundidade. Cada partícula primária e secundária irá depositar uma quantidade de energia, δE , num local entre x e $x+\Delta x$ correspondente a um canal i . Para o evento j um canal em particular

será preenchido várias vezes com a quantidade δE , a qual irá ser adicionada a ΔE_i .

- Operações em histogramas - Após o preenchimento dos histogramas e antes da saída destes, o utilizador pode fazer algumas operações simples, como a adição ou multiplicação de histogramas. Há várias operações disponíveis, mas antes de qualquer outra operação, deve primeiro ser chamada uma das duas rotinas, *ulhfre* ou *ulhave* para obter um cálculo correcto das incertezas.
- Operações sobre histogramas – Com o pacote de histogramação é possível fazer várias operações sobre histogramas, descritas abaixo:

Operação	Fórmula	Erro
Soma de dois histogramas	$q_3 = a q_1 + b q_2$	$\delta q_3 = \sqrt{a^2 (\delta q_1)^2 + b^2 (\delta q_2)^2}$
Multiplicação de dois histogramas	$q_3 = a q_1 \times q_2$	$\delta q_3 = a \sqrt{q_2^2 (\delta q_1)^2 + q_1^2 (\delta q_2)^2}$
Divisão de dois histogramas	$q_3 = a \frac{q_1}{q_2}$	$\delta q_3 = a \sqrt{\frac{(\delta q_1)^2}{q_2^2} + \frac{q_1^2 (\delta q_2)^2}{q_2^4}}$
Multiplicação de um histograma por uma constante	$q_3 = a q_1$	$\delta q_3 = a \delta q_1$
Raíz quadrada de um histograma	$q_3 = \sqrt{q_1}$	$\delta q_3 = \frac{1}{2} \frac{\delta q_1}{q_1}$
Exponencial de um histograma	$q_3 = e^{b q_1}$	$\delta q_3 = b q_1 \delta q_1$
Logaritmo de um histograma	$q_3 = \ln q_1$	$\delta q_3 = \frac{\delta q_1}{q_1}$

Tabela 4.2 – Tipos de operações sobre histogramas

5 Braquiterapia

5.1 Princípios básicos de braquiterapia

A radioterapia é uma das modalidades terapêuticas usadas no tratamento de cancro e pode ser usada isoladamente, associada com cirurgia, com quimioterapia ou ambas. O objectivo da radioterapia é o de fornecer a dose de radiação prescrita num tumor, poupando o mais possível os tecidos normais ao seu redor. Radioterapia pode ser subdividida em radioterapia externa e braquiterapia (radioterapia interna), dependendo da posição da fonte de radiação em relação ao paciente. Na braquiterapia (BT) são usadas pequenas fontes radioactivas encapsuladas (por exemplo, Pd-103, I-125, Ir-192, Cs-137, etc) que são colocadas perto do tumor ou do volume a ser tratado, enquanto que na radioterapia externa, o paciente é irradiado com feixes de fótons, electrões, prótons e outras partículas ionizantes a partir do exterior.

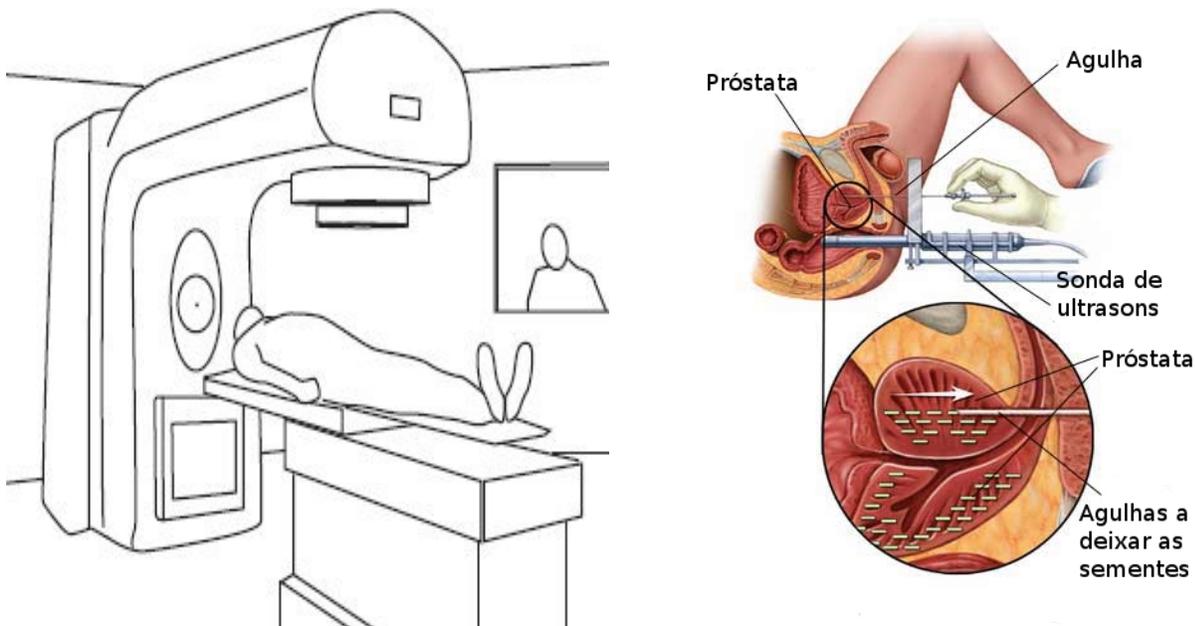


Figura 5.1 – Diagrama esquemático de um sistema de radioterapia externa. (figura à esquerda) [Rad07] e ilustração de uma implementação de sementes – braquiterapia – para um tratamento de cancro na próstata. (figura à direita) [Bra07].

Com a braquiterapia, muitas vezes é possível fornecer uma dose de radiação localizada ao volume do tumor, poupando os tecidos à volta, devido ao rápido decréscimo de dose depositada com a distância à fonte [Kha94]. No entanto, este benefício causa dificuldades na especificação e avaliação da dose, uma vez que uma pequena diferença de alguns milímetros na posição prescrita ou no ponto da superfície pode dar origem a uma grande diferença relativamente à dose calculada devido aos elevados gradientes de dose na vizinhança imediata das fontes [And95-1]. Esta situação é mais relevante se houverem órgãos críticos na vizinhança da fonte pois estes podem receber doses elevadas e conseqüentemente aumentar a probabilidade de serem infligidos danos a tecidos saudáveis. Contudo tem de ser sublinhado que as fontes de braquiterapia capazes de fornecer doses elevadas, são colocadas com procedimentos que garantem uma alta precisão na sua localização (pois geralmente o tumor encontra-se na proximidade de órgãos muito radiosensíveis).

A braquiterapia pode ser caracterizada através de [Air93, Gla98, God88, Kha94]:

- O método de posicionamento físico das fontes radioactivas dentro ou perto do tumor: intersticial, intraluminal, superficial e intracavitário. O posicionamento das fontes pode ser permanente ou temporário;
- A intensidade das fontes radioactivas e da taxa de dose. Por exemplo, tumores ginecológicos podem ser tratadas com fontes de Cs-137 com uma actividade máxima de 1,48 GBq por aglomerados de fontes, que emitem em baixa taxa dose (entre 0,4 a 2 Gyh⁻¹) ou com fontes de Ir-192 com uma actividade máxima de 370 GBq, que emitem uma alta taxa de dose (superior a 12 Gyh⁻¹), tal como definido pela Comissão Internacional de Unidades e Medições Radiação (ICRU) no relatório 38 [ICR85];
- A duração do tratamento, que pode ser de alguns minutos (em tratamentos de alta taxa de dose), horas ou até mesmo dias (em tratamentos de baixa taxa de dose), dependendo da intensidade (“strength”) da fonte, da dose prescrita e da geometria do implante;
- O sistema de dosimetria utilizado para prescrever, descrever e determinar a dose de radiação. O método de posicionamento físico é escolhido dependendo da localização do tumor e da sua dimensão:

- em BT intersticial, as fontes são implantadas em tecidos (por exemplo, cabeça e pescoço, mama, próstata), utilizando agulhas ou catéteres;
- em BT intraluminal, as fontes são colocadas no lúmen dos órgãos (por exemplo, brônquios, esófago);
- em BT superficial, as fontes estão apoiadas em moldes, ao longo de um tumor (por exemplo, pele);
- em braquiterapia intracavitária (ICBT), as fontes são inseridas em cavidades naturais do corpo (por exemplo: vagina, fossas nasais) utilizando aplicadores.

Na década de 60, a braquiterapia experimentou um importante avanço tecnológico com a invenção de dispositivos remotos de *afterloading*, onde contentores de fontes vazios (aplicadores, agulhas, etc) são colocados numa cavidade corporal ou no tecido e as fontes carregadas remotamente mais tarde. Isso permitiu o desenvolvimento de fontes radioactivas com elevada actividade específica sendo fortemente reduzida a exposição à radiação dos membros do pessoal [AAP93].

Os sistemas dosimétricos em braquiterapia foram criados devido à necessidade de determinar a distribuição de dose em torno das fontes para a prescrição de tratamentos de uma forma sistemática e reproduzível. O relatório 38 da ICRU afirma que um sistema de dosimetria em braquiterapia denota um conjunto de regras tendo em conta a fonte, geometria e método de aplicação, a fim de obter dose adequada distribuição ao longo do volume a ser tratado [ICR85].

Nas décadas de 50 e 60 as aplicações de braquiterapia intersticial eram geralmente baseadas no sistema de implante *Quinby* ou *Manchester*. As regras de distribuição destes sistemas especificavam o arranjo geométrico das agulhas de rádio relativamente aos limites do volume-alvo. Eram utilizados acessórios manuais, tais como tabelas de exposição em função da área ou volume do implante, para estimar a exposição prescrita por um critério bem definido de especificação de dose reconhecido pelo sistema.

Houve três desenvolvimentos na tecnologia do planeamento em braquiterapia durante os últimos 50 anos que alteraram drasticamente a sua prática clínica:

- cálculos de isodose com computadores;

- imageologia tridimensional para definição dos volumes-alvo e para guiar a inserção de aplicadores;
- otimização de dimensões e tempos de permanência dos implantes de *afterloading*.

O cálculo manual de doses de várias fontes arbitrariamente orientadas eram simplesmente impossíveis antes da introdução do planeamento assistido por vários computador na década de 60. Desenvolvimentos subsequentes incluíram cálculos tridimensionais e índices baseados em histogramas dose-volume (HDV) para quantificar a dose administrada e a qualidade dos implantes. Na sua forma mais simples um HDV representa uma frequência da distribuição de dose com valores definidos dentro de um volume. Os histogramas geralmente aparecem em percentagem de volume total em vez de frequência nas ordenadas e dose nas abcissas. [Par05]

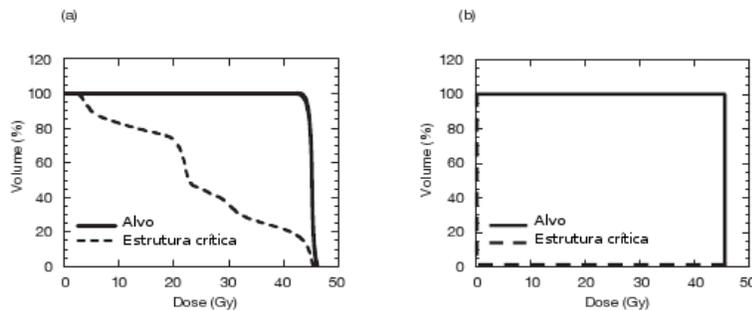


Figura 5.2 – (a) HDV para um planeamento de um tratamento de próstata por radioterapia externa; (b) HDV ideal [Par05].

Os histogramas dose/volume permitem estudar em detalhe como se está a alcançar a região de interesse (ROI), que no caso de tratamentos deste tipo será a região com tecidos não saudáveis.

A localização do volume-alvo e dos tecidos normais em torno deste, com limitações de dose, pode ser feita através do uso de tomografia axial computadorizada (TAC), raios-X e outras tipos de imageologia tridimensional, permitindo o planeamento da dose a fornecer ao paciente.

Devido a todos os tipos de problemas físicos e químicos que a fonte pode

causar dentro do corpo humano, a sua estrutura é feita de modo a isolar o material radioactivo e conter as partículas beta, pois estas têm um elevado poder de ionização. Dessa forma, o material radioactivo é selado numa cápsula com invólucro metálico, geralmente de titânio. A fonte possui habitualmente um marcador rádio-opaco no seu interior. Todas as fontes são seladas, sendo que o Ir-192, é fabricado em forma de fios cortados na medida necessária à aplicação. Na tabela abaixo encontra-se uma lista de fontes de utilização mais comum.

Radionuclídeos	Energia dos fotões (MeV)		Tempo de meia-vida	Atenuação no chumbo (aprox.) (mm)		Constantes de taxa de kerma em ar ($\mu\text{Gy}\cdot\text{m}^2\cdot\text{GBq}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$)
	Média	Máx.		Camada semi-redutora	Camada deci-redutora	
Co-60	1.25	1.33	5.27 anos	12	45	309
Pd-103	0.021	0.023	17.0 dias	0.03	0.1	35
I-125	0.028	0.035	60 dias	0.03	0.1	33
Cs-137	0.662	0.662	30.0 anos	6.5	22	78
I-192	0.37	0.61	74 dias	4.5	15	113
Au-198	0.42	0.68	2.7 dias	16	45	195
Ra-226	~1	2.4	1600 anos	16	45	195

Tabela 5.1 – Características de alguns radionuclídeos utilizados em braquiterapia. [Wil00]

➤ Rádio-226

As fontes de rádio foram bastante utilizadas no passado, pois estas existiam naturalmente com uma actividade específica razoável. Foi a primeira fonte utilizada e foi adquirida muita experiência com o seu uso. No entanto, esta fonte possui algumas desvantagens principalmente no que se refere à radiação dos seus descendentes. O rádio decai em rádio-222, um gás emissor de partículas alfa, possuindo um pequeno tempo de meia-vida, e que decai noutros emissores de partículas alfa e beta.

➤ Césio-137

Esta fonte é actualmente a fonte mais utilizada. O seu tempo de meia-vida é de 30 anos e emite partículas beta (absorvidas pelo encapsulamento metálico) e radiação gama de 662 keV. Comercialmente é apresentada na forma de tubos para aplicadores ginecológicos e sementes para implantes. A vantagem do césio é o seu longo tempo de meia-vida, que permite a utilização da fonte por muitos anos. A vida útil recomendada pela indústria para esta fonte é de 10 anos.

➤ Irídio-192

O irídio-192 possui um decaimento beta com tempo de meia-vida de 74 dias e a sua principal radiação gama tem uma energia de 370 keV. Esta fonte é normalmente utilizada em forma de fio sendo classificada como fonte selada. A vantagem da utilização em forma de fio é o facto de este poder ser cortado no tamanho necessário para ser ajustado ao tumor. No entanto, o processo de cortar o fio e colocá-lo em pequenos tubos de plástico que o posicionarão no tecido, faz com que o técnico receba radiação na região dos dedos. Uma forma alternativa é a utilização de sementes de Ir-192 colocadas em fitas de nylon. Essas fitas possuem geralmente 12 sementes com espaçamento do 1 cm entre si. Cada semente é encapsulada em aço inoxidável, fazendo da fita uma fonte selada, que pode ser cortada no espaço entre as sementes, para adequar-se ao tamanho necessário. As fontes de HDR (High dose rate) também são geralmente feitas de Ir-192, apresentadas em pequenos cilindros de 0,6 mm de diâmetro e 3,5 de comprimento, possuindo 3 mm de comprimento activo, para o uso em pós-carregadores (*afterloading*). O irídio-192 é usado em implantes mamários (na forma de fios), implantes de língua (na forma de pinos), e em vários tratamentos HDR intracavitários e intersticiais.

➤ Cobalto-60

As fontes de cobalto são as menos utilizadas. Estas possuem decaimento beta com emissão associada de raios gama de 1,17 e 1,33 MeV. No passado foram utilizadas em forma de fio, porém deixaram de ser usadas nessa forma, pois este quebrava facilmente. É ainda utilizado em aplicadores

oftalmológicos, com agulhas ou tubos, e em tratamentos HDR ginecológicos, na forma de grânulos.

➤ Ouro-198

O ouro-198 tem um tempo de meia-vida de 2,7 dias e é utilizado em implantes permanentes por causa do seu pequeno tempo de meia-vida. Esta fonte possui várias radiações gama, sendo a de 412 keV a mais intensa. O ouro é utilizado normalmente na forma de grãos cilíndricos ou sementes, com 0,8 mm de diâmetro e 2,5 mm de comprimento. Além de implantes permanentes, como os de próstata, esta fonte também pode ser utilizada em pequenas áreas, como a língua, onde implantes com agulhas podem ser bastante desconfortáveis.

➤ Iodo-125

O iodo-125 decai via captura electrónica para o primeiro estado excitado do Te-125, com um tempo de meia-vida de 59,4 dias, do qual 93% corresponde a conversão interna e 7% a emissão gama de 35,5 keV. A captura electrónica e a conversão interna produzem raios-X de 27,4 e 31,4 keV. A baixa energia dos fótons do I-125 (assegurada pela superfície das sementes), permite que o paciente se mova durante o tratamento, podendo ter uma vida normal fora do hospital.

➤ Paládio-103

O paládio-103 também decai via captura electrónica geralmente para o primeiro e segundo estados excitados do Rh-103, com tempo de meia-vida de 17,0 dias. Este, em consequência da conversão interna, gera raios-X característicos de 20,1 e 23,0 keV, e emite gamas de 21 keV. O encapsulamento do Pd-103 é similar ao do I-125, e as fontes podem ser usadas em implantes permanentes para tratar tumores de rápido crescimento na próstata.

A dosimetria, neste contexto, refere-se à estimativa de distribuição da dose através de técnicas experimentais ou modelos teóricos fundamentais em torno de fontes isoladas para braquiterapia.

Antes de 1940, a comunidade de física radiológica lutou com problemas de reprodutibilidade dos tratamentos de braquiterapia. Este vazio foi preenchido pela

utilização de vários dosímetros biológicos e químicos que permitiram mapear distribuições de dose em torno das sementes.

No período entre 1950 e 1980 o planeamento dos tratamentos para braquiterapia fez a transição de sistemas baseados em tabelas de distribuições a 2D para planeamentos 3D específicos para cada paciente. Nos EUA, o NIST desenvolveu padrões primários de referência para taxas de exposição baseados em câmaras de ionização esféricas com paredes de carbono para fontes de Cs-137 e Co-60 em 1974, e para fontes de Ir-192 em 1980. Nos anos 80 as quantidades "massa equivalente de rádio" e "taxa de exposição de referência" foram substituídas por taxa de referência de kerma em ar ou pela intensidade de kerma em ar.

À medida que o papel clínico do rádio cresceu, alguns autores procuraram mapear de uma forma mais quantitativa as distribuições de dose de fontes de rádio por meios experimentais, o que requer câmaras de ionização com paredes de ar ou tecidos equivalentes para quantificar os pequenos desvios das fontes seladas em relação à lei do inverso do quadrado da distância. Outro importante avanço foi a introdução de soluções unidimensionais da equação de transporte de Boltzmann, tanto determinísticas como por Monte Carlo. Uma vez que os parâmetros dos algoritmos unidimensionais de integração de trajetórias dependiam somente do espectro primário do radionuclídeo e do material de encapsulamento, distribuições de dose para fontes isoladas de forma arbitrária podiam ser geradas sem necessidade de medidas específicas, o que foi justificado por vários estudos posteriores, excepto para fontes de energia muito baixa, como as de I-125.

O desenvolvimento das abordagens quantitativas modernas de dosimetria para braquiterapia está intimamente ligado com a utilização clínica das sementes de baixa energia I-125 e Pd-103. O desenvolvimento de padrões primários de intensidade de kerma em ar pelo NIST consistiu num marco para a braquiterapia com sementes de baixas energias.

Um avanço significativo na braquiterapia com fotões de baixa energia foi a implementação, em 1999, de um novo padrão primário pelo NIST para a intensidade de kerma em ar. Este novo padrão utiliza uma câmara de ar livre com

grande abertura angular desenhada para filtrar contaminações de raios-X de baixas energias e com um maior volume sensível de modo que sementes individuais podem ser medidas com precisão. Esta funcionalidade dedicada à calibração permite que novas fontes de braquiterapia sejam adicionadas ao sistema de padrões à medida que são introduzidos no mercado e permite que os fabricantes comparem periodicamente os seus processos de calibração com o NIST de modo a manter a possibilidade de rastreio ao padrão primário.

O formalismo para cálculo de dose proposto pelo primeiro relatório do TG-43, publicado em 1995 utilizou distribuições de dose de sementes isoladas medidas e calculadas por simulação Monte Carlo em vez de se basearem em modelos semi-empíricos. O TG-43 apresentou os resultados de simulação Monte Carlo para os modelos 6711 e 6702 das fontes de I-125, modelo 200 da fonte de Pd-103 e das sementes de aço e cerâmica de Ir-192. Para cada uma destas fontes, foi recomendado um conjunto de dados consensual, que inclui constantes de taxas de doses, factores e funções radiais e de anisotropia. Foi posteriormente publicada uma nova revisão do relatório TG-43 em 2004, com mudanças no formalismo e parâmetros de dosimetria consensuais para oito fontes comercialmente disponíveis, assim como directrizes para a realização de dosimetria com Monte Carlo.

Devido ao facto da dosimetria por simulação Monte Carlo estar sujeita a erros sistemáticos potencialmente grandes e imprevisíveis, a caracterização das taxas de dose para fontes de baixa energia continuam a ser indicadas experimentalmente e por Monte Carlo.

Outro desenvolvimento recente é a extensão dos cálculos de Monte Carlo para o planeamento do tratamento, isto é, a distribuição de dose específica no paciente levando-se em conta a posição real das sementes implantadas. Ao contrário dos métodos analíticos, as técnicas de Monte Carlo podem levar em conta heterogeneidades na composição dos tecidos, blindagem do aplicador e atenuação entre sementes.

Em resumo, a maioria dos sistemas dosimétricos disponíveis hoje em dia foram definidos empiricamente durante mais de cinquenta anos para fontes de Ra-226. Estes sistemas foram modificados, adaptados e melhorados:

- através da experiência clínica adquirida ao longo dos anos;
- a invenção do *afterloading* remoto;
- a produção de fontes radioactivas com uma actividade específica elevada comparativamente ao Ra-226, como por exemplo as fontes de Co-60, Cs-137 e Ir-192;
- a utilização de imagens, em particular radiografias e mais recentemente o TC, ultra-som e a ressonância magnética (RM);
- a melhoria dos formalismos de cálculo de dose.

5.2 Dosimetria em Braquiterapia

Ao longo das últimas duas décadas, a braquiterapia (BT) passou por um rápido desenvolvimento e está actualmente a enfrentar novos desafios [Cum02, Dee00, Mar98, Sti97]. Na dosimetria em braquiterapia, é possível mencionar:

1. O desenvolvimento de novas fontes radioactivas de baixa energia, incluindo Pd-103, Am-241, Sm-143 e Yb-169, com fotões de energias no intervalo de 20-100 keV [Wil95];
2. A validação das técnicas de medição de dose em braquiterapia e a aceitação das distribuições de dose medidas directamente no planeamento de tratamentos clínicos [AAP95, Wil95];
3. O desenvolvimento de um novo formalismo de cálculo de dose [ICW90, AAP95] e especificações da intensidade da fonte [CFM83, BCR84, AAP87, AAP91] para facilitar a computação da dose clínica usando directamente medidas ou cálculos com as distribuições de dose das fontes radioactivas dadas por simulações de Monte Carlo (MC).

As a quantificação das distribuições de dose em braquiterapia, quer por medições experimentais ou por cálculos MC, é um desenvolvimento relativamente recente na física de BT clínica. A braquiterapia tem ficado bastante atrasada em relação à radioterapia externa neste aspecto, mas está finalmente a avançar para o uso de distribuições de dose medidas directamente para planeamento e validação de simulações MC como ferramentas de dosimetria clínica [Wil95].

A precisão dos cálculos da dose no planeamento dos tratamentos em BT

depende da precisão dos dados dosimétricos obtidos para as fontes radioactivas. A simetria cilíndrica ou esférica da maior parte das fontes utilizadas em BT levaram ao desenvolvimento de modelos de cálculo de dose que tiraram vantagem dessa simetria [God88, AAP95]. Têm sido usados vários métodos teóricos para calcular a distribuição de dose para fontes esféricas e cilíndricas. Estes métodos variam deste a contribuição da integração numérica de uma fonte pontual até simulações MC [Wil95].

Em 1995, a Associação Americana de Físicos em Medicina (AAPM) recomendou um novo formalismo de cálculo de dose, que se tornou conhecido como "*AAPM Task Group 43*" [AAP95]. O relatório Task Group também recomenda uma nova maneira de especificar a intensidade da fonte, baseada na taxa de kerma em ar. O formalismo do modelo de dose foi desenvolvido para fontes radioactivas utilizadas em braquiterapia intersticial, ou seja, Ir-192, I-125 e Pd-103.

Recentemente, este formalismo foi actualizado [AAP04], a fim de incluir as cerca de vinte novas fontes de braquiterapia intersticial de baixa energia, como o Pd-103 e I-125, que foram introduzidos no mercado desde a publicação da Task Group 43, em 1995. Numa nova actualização está prevista a inclusão de fontes que emitam fótons de alta energia, isto é, Ir-192 e Cs-137.

5.2.1 Especificação da intensidade da fonte

Historicamente, a intensidade da fonte (expressão 5.2) em braquiterapia foi especificada em termos da massa de rádio encapsulado, m_{Ra} , juntamente com a espessura da parede de filtração. A utilização de substitutos do rádio levou a muitas considerações de modo a otimizar a especificação da intensidade da fonte de forma a que a experiência clínica adquirida com o uso do rádio não fosse perdida com o uso de outros radionuclídeos. As seguintes quantidades foram adoptadas ao longo dos anos para especificar a força de uma fonte em braquiterapia:

- actividade da fonte, A ;
- actividade aparente, A_{app} ,
- massa equivalente de rádio, m_{eq} ,
- taxa de exposição de referência, R_x ,

- taxa de kerma em ar de referência, RAKR,
- intensidade de kerma em ar, S_K [God88, AAP91].

As especificação das quantidades associadas à intensidade da fonte em braquiterapia podem ser separadas em duas categorias:

- medição da radioactividade que realmente tem a fonte;
- medição da radioactividade à saída da fonte [AAP91].

As quantidades *massa de rádio* e *actividade* são exemplos de medidas de radioactividade contida, enquanto que as quantidades *massa equivalente de rádio* e *actividade aparente* são exemplos de medidas à saída da fonte.

A quantidade de radiação medida à saída da fonte é equivalente a medir a radioactividade à saída de uma fonte em vácuo, corrigindo a absorção e dispersão no meio (neste caso é o ar que contém uma calibração geométrica [AAP90]) ao longo do eixo bissector transverso da fonte (eixo perpendicular à longitudinal ou ao eixo de simetria da fonte) a uma grande distância em relação às dimensões da fonte e do detector. Algumas quantidades de saída são descritas directamente em termos de taxa de kerma em ar num ponto de referência, enquanto que no caso da massa equivalente de rádio e da actividade aparente especificam a saída da fonte padrão.

Para superar o problema da especificação da intensidade da fonte em termos da actividade foi introduzido o termo *actividade aparente* que é definido como a actividade de uma fonte pontual, não filtrada, de um dado nuclídeo que produz a mesma taxa de exposição à distância de calibração que a fonte a ser especificada. A actividade aparente não é o mesmo de actividade corrente, na qual é medida a actividade real da fonte dentro do invólucro. Por esta razão a actividade aparente tem um valor menor do que a actividade.

A quantidade massa equivalente de rádio é definida como a massa de Ra-226 encapsulada em 0.5 mm de platina, que produz a mesma taxa de exposição à distância de calibração que a fonte especificada [AAP87].

A taxa de dose de referência é definida como taxa de exposição, \dot{X}_0 , medida ao longo do eixo bissector transverso da fonte à distância de referência d_0 , ao quadrado.

A quantidade de referência kerma em ar foi introduzida pela CFMRI (*Comité*

Français pour le Measure des Rayonnements Ionisants), BCRU (*British Committee on radiation units and Measurements*) e ICRU (*International Commission on Radiation Units and Measurements*) e é definida como a taxa de kerma para ar, em ar, \dot{K}_0 , a uma distância de referência de 1 metro corrigida para a atenuação do ar. A quantidade intensidade de kerma em ar num espaço livre foi introduzida mais tarde pela AAPM (*American Association of Physicists in Medicine*) e é definida como o produto da taxa de kerma em ar num espaço livre medido ao longo do eixo bissector transverso da fonte pelo quadrado da distância. A distância medida tem de ser suficientemente grande para que tanto a fonte como o detector sejam pontuais (normalmente 1m) [AAP91].

Em sumário, as relações seguintes descrevem os diferentes modos de expressar a força de uma fonte em braquiterapia:

$$S_K = A_{app} \Gamma_X (W/e) \quad (5.1)$$

$$S_K = m_{eq} \Gamma_{X, Ra, 0.5} (W/e) \quad (5.2)$$

$$S_K = R_X (W/e) = \dot{X}_0 d_0^2 (W/e) \quad (5.3)$$

$$S_K = RAKR = \dot{K}_0 d_0^2 (W/e) \quad (5.4)$$

onde (W/e) é a energia média necessária para produzir um par de iões no ar e tem o valor de $0.876 \text{ cGyR}^{-1} = 33.97 \text{ J/C}$; Γ_X é a constante de taxa de exposição e é apenas definida para fótons emitidos. Esta constante é característica do radionuclídeo e é definida para uma fonte pontual não encapsulada ideal, ou seja, os efeitos do encapsulamento não estão incluídos, e é expresso em $\text{mRm}^2\text{h}^{-1}\text{mCi}^{-1}$; $\Gamma_{X, Ra, 0.5}$ é a constante taxa de exposição para a fonte de Ra-226 dentro de uma cápsula de 0.5 mm de platina. Neste caso a cápsula da fonte é tomada em conta. Para qualquer isótopo com o objectivo de substituir directamente o rádio, e é calibrado em massa equivalente de rádio, a constante de taxa de exposição é $8.25 \text{ R.cm}^2.\text{mg}^{-1}.\text{h}^{-1}$.

A actividade aparente, A_{app} , relaciona-se com a taxa de exposição, \dot{X}_0 e com a taxa de kerma em ar, \dot{K}_0 como [AAP95]

$$A_{app} = \frac{\dot{X}_0 d_0^2}{\Gamma_X} = \frac{\dot{K}_0 d_0^2}{\Gamma_X (W/e)} = \frac{\dot{K}_0 d_0^2}{\Gamma_K} \quad (5.5)$$

onde Γ_K é a constante de taxa de kerma em ar.

A quantidade taxa de kerma em ar pode ser directamente ligada a um padrão nacional [AAP87]. Adicionalmente, a taxa de dose em tecidos, na quantidade de interesse em dosimetria clínica, está muito mais relacionada com a taxa de kerma em ar do que com a actividade de uma fonte encapsulada. O conhecimento da constante de taxa de exposição torna-se assim desnecessário.

O relatório 21 da AAPM sobre especificações da intensidade da fonte em braquiterapia diz que pode ser usada outra quantidade para especificar a intensidade da fonte que é a taxa de dose a uma distância específica num meio [AAP87]. Contudo convém salientar que a razão para esta quantidade não ser recomendada é o facto desta ser muito difícil de medir junto às fontes de interesse clínico. É com problemas como este que as técnicas de Monte Carlo podem fazer realmente uma grande diferença pois é possível modelar um aparato de braquiterapia completo e depois obter valores constantes de taxa de dose num ponto específico em qualquer meio. Na tabela 5.2 são apresentadas as quantidades (e unidades) mais usadas em braquiterapia.

Quantidade	Símbolo	Unidades		
		Tradicional	SI	Recomendado
Comprimento	r, l, h	cm	m	cm, m
Tempo	t	h	s	h
Actividade	A	mCi	Bq	MBq
Exposição	X	R	C.kg ⁻¹	-
Taxa de exposição	\dot{X}_0	R.h ⁻¹	C.s ⁻¹ .kg ⁻¹	-
Kerma em ar	K	rad	Gy	Gy
Taxa de kerma em ar	\dot{K}_0	rad.h ⁻¹	Gy.s ⁻¹	Gy.h ⁻¹
intensidade de kerma em ar	S_K	rad.cm ² .h ⁻¹	Gy.m ² .s ⁻¹	U=μGy.m ² .h ⁻¹
Dose absorvida	D	rad	Gy	Gy
Taxa de dose absorvida	\dot{D}	rad.h ⁻¹	Gy.s ⁻¹	Gy.h ⁻¹
Constante de taxa de exposição	Γ_X	R.cm ² .mCi ⁻¹ .h ⁻¹	C.m ² .Bq ⁻¹ .s ⁻¹	-
Constante de taxa de kerma em ar	Γ_K	rad.cm ² .mCi ⁻¹ .h ⁻¹	Gy.m ² .Bq ⁻¹ .s ⁻¹	μGy.m ² .Bq ⁻¹ .s ⁻¹
Massa equivalente de rádio	m_{eq}	mq	kg	-
Factor de geometria	$G(r, \theta)$	cm ²	m ²	cm ² , m ²
Coefficiente de atenuação efectivo	μ	cm ⁻¹	m ⁻¹	cm ⁻¹ , m ⁻¹

Tabela 5.2 – Quantidades e unidades usadas em braquiterapia [AAP87]

5.2.2 Formalismo do cálculo de dose por AAPM Task Group 43

Os dados para o modelo de dose do *Task Group 43* baseia-se em medidas, tais como a taxa de kerma em ar, e nas distribuições de dose de fontes, calculadas por MC, como a função dose radial e a função de anisotropia [AAP95].

$$\dot{D}(r, \theta) = S_K \cdot \Lambda \cdot \frac{G_L(r, \theta)}{G_L(r_0, \theta_0)} \cdot g_L(r) \cdot F(r, \theta) \quad (5.6)$$

onde r denota a distância do centro da fonte até o ponto de interesse, r_0 denota a distância de referência, θ o ângulo polar que especifica o ponto de interesse $P(r, \theta)$, relativamente ao eixo longitudinal da fonte.

O ângulo de referência θ_0 , define o plano transversal da fonte, e é geralmente $\pi/2$ e $\dot{D}(r, \theta)$ é a taxa de dose no ponto de interesse.

A intensidade de kerma em ar é uma grandeza obtida a partir de medidas de taxas de kerma em ar a distâncias grandes comparadas às dimensões da fonte. A constante de taxa de dose na água, Λ , depende do radionuclídeo e do modelo da fonte, $G_L(r, \theta)$ a função geométrica para fontes lineares, utilizada na interpolação entre valores tabelados de taxas de dose em determinados pontos.

A função radial de dose, $g_L(r)$, que descreve o decréscimo na dose depositada no plano transversal devido à dispersão e atenuação dos fótons (excluindo o decréscimo na dose devido à função geométrica), e a função bidimensional de anisotropia, $F(r, \theta)$, descreve a variação na dose como uma função do ângulo polar relativamente ao plano transversal.

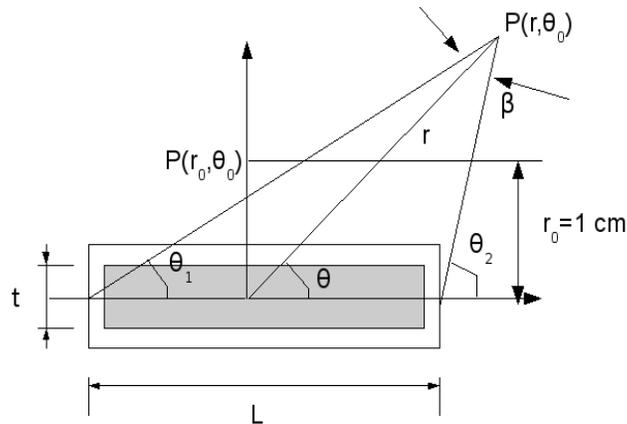


Figura 5.3 – Sistema de coordenadas usado nos cálculos de dosimetria em braquiterapia.

A geometria das fontes e sua estrutura interna são específicas de cada fabricante. Modelos de fontes variam de fabricante para fabricante em relação à espessura e tipo de cápsula, solda usada, material de suporte para o radioisótopo, presença de materiais rádio-opacos com bordas angulosas ou arredondadas, presença de prata – que produz raios-X característicos e modifica

o espectro de fótons – entre outros. Todas estas propriedades afectam as características dosimétricas das fontes.

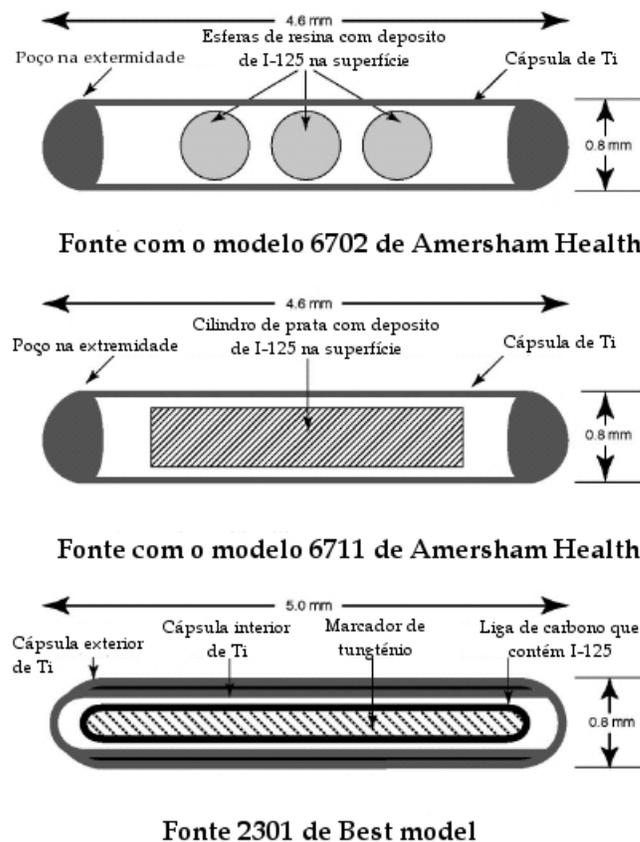


Figura 5.4 – Sementes de braquiterapia examinadas no relatório: (a) modelo 6702 da fonte da Amersham, (b) modelo 6711 da fonte da Amersham, (c) Fonte 2301 da Best. A cápsula de titânio tem uma espessura de 0,06 mm para a Amersham e para a semente da Best a espessura é de 0,04 [AAP04].

Por exemplo, a fonte 6702 da Amersham utiliza um número variável de matrizes esféricas de resina revestidas ou impregnadas com o radioisótopo. Outras fontes utilizam barras de prata ou blocos de grafite como suporte. Os marcadores rádio-opacos utilizados para localização radiográfica da fonte também perturbam o espectro. O conhecimento detalhado da geometria interna da fonte e dos detalhes de construção é especialmente importante para a modelagem pelo método de simulação Monte Carlo. A actualização do relatório TG 43 da AAPM faz descrições detalhadas dos modelos de sementes actualmente em uso, bem

como tabelas de valores para as grandezas dosimétricas relevantes para o cálculo das taxas de dose. A figura 5.4 mostra três exemplos de sementes utilizadas de um modo comum em braquiterapia.

5.2.2.1 Kerma em ar

A quantidade kerma em ar, S_K , já definida anteriormente, tem um valor numérico idêntico ao da taxa referência de kerma em ar (*Reference Air Kerma Rate*, ou AKR). Por conveniência, a sua unidade é U, onde $1 \text{ U} = 1 \mu\text{Gy}\cdot\text{m}^2\cdot\text{h}^{-1}$. A quantidade d é a distância do centro da fonte ao ponto especificado por $\dot{K}_\delta(d)$, que pode ser localizado no plano transversal da fonte. A distância d deve ser maior que a dimensão linear da fonte para que S_K seja independente desta. Assim, $\dot{K}_\delta(d)$, é geralmente aferido à distância de 1 metro. Como o S_K é definido no vácuo, quando é gerado a partir de medidas experimentais, tem que ser corrigido com a atenuação e a dispersão de fótons no ar. Para evitar as correções, o AKR também pode ser medido teoricamente. A energia de corte δ é a energia de exclusão de fótons de baixa energia ou de fótons contaminantes que aumentam o $\dot{K}_\delta(d)$ sem contribuir significativamente para a dose em distâncias maiores que 1 mm no tecido ou na água. O valor típico de δ é de 5 keV para fótons de baixa energia emitidos por fontes de braquiterapia. [AAP04]

Para medir S_K de um modo mais preciso foi construída a câmara de ar livre com um ângulo grande (WAFAC – *wide-angle free-air chamber*) no NIST, com a qual é possível medir valores mais precisos da kerma em ar. Na tabela abaixo estão referidos alguns de valores de S_K para fonte de iodo-125.

Fabricante e tipo de fonte	Radioisótopo	S_K
Amersham 6702	I-125	$0.898 \pm 0.014 \text{ U}$
Amersham 6711	I-125	$0.896 \pm 0.010 \text{ U}$

Tabela 5.3 – Valores da intensidade ar-kerma para o iodo-125 calculados entre 1997-1998, pelo NIST. A AAPM recomenda o uso de $S_K=0,897$ para todas as fontes de iodo-125, incluindo a NASI 3631 A/S e A/M. [NIS98]

5.2.2.2 Constante de taxa de dose

A constante de taxa de dose, Λ , é definida como a taxa de dose na água num ponto $P(r_0, \theta_0)$ por unidade de S_K . Esta constante depende tanto do radionuclídeo quanto do modelo da fonte, e é influenciada tanto pela geometria interna da fonte como pela metodologia experimental utilizada para determinar o S_K .

$$\Lambda = \frac{\dot{D}(r_0, \theta_0)}{S_K} \quad (5.7)$$

Com o objectivo de determinar a intensidade de kerma em ar para fotões de baixa energia emitidos por fontes de braquiterapia, o NIST calculou a constante para algumas fontes usando a WAFAC. Na tabela 4.4 vemos os valores médios para as fontes mais comuns.

Fabricante e tipo de fonte	Radioisótopo	Λ
Amersham 6702	I-125	1.036
Amersham 6711	I-125	0.965
Best Industries 2301	I-125	1.018
NASI MED3631-A/M	I-125	1.036
Bebig Theragenics I25.S06	I-125	1.012
Imagyn IS-12501	I-125	0.940
Theragenics 200	Pd-103	0.686
NASI MED3633	Pd-103	0.688

Tabela 5.4 – Dados padrão do NIST, calibrados pela WAFAC, da intensidade ar-kerma para cada industria e a sua constate de taxa de dose. Os valores são calculados baseado na intensidade ar-kerma de apenas uma semente [AAP04].

O cálculo dessa constante deve ser o mais preciso possível, visto que é esse termo que transforma a distribuição de dose em taxa de dose absoluta depositada no paciente. O método de Monte Carlo é uma alternativa para encontrar o seu valor, pois possui certa liberdade no posicionamento do detector e outros equipamentos, diminuindo a incerteza no seu valor, e podendo estimá-lo

a curtas e longas distâncias. A simulação Monte Carlo é efectuada para duas situações distintas:

- uma com a fonte num fantoma, estimando a dose em pontos específicos;
- a segunda com a fonte no vácuo ou numa grande esfera de ar.

A constante de taxa de dose pode ser estimada usando a equação da definição da mesma. O código de Monte Carlo pode estimar a dose absorvida ou o kerma colisional por evento, e da mesma forma é avaliado o S_K . No entanto, a incerteza no valor da constante depende muito da descrição da estrutura interna da fonte. Por isso, não é recomendado o uso dos valores obtidos com o Monte Carlo sem confirmação experimental.

Na medição experimental, deve-se ter grande controle para tentar minimizar artefactos do detector como a dependência com a taxa de dose, dose não-linear, dependência com a energia, estabilidade temporal das leituras e coeficientes de calibração e precisão com o posicionamento do detector tanto na calibração do detector quanto na medição da fonte. Sabe-se que cada tipo de fonte possui vários parâmetros geométricos, com incertezas desconhecidas, que na maioria das vezes aumentam o erro da medida experimental.

Seja qual for a forma de medição, uma avaliação rigorosa das incertezas das medidas é necessária. O LIBD (*Low-energy Interstitial Brachytherapy Dosimetry Subcommittee of AAPM Radiation Therapy Committee*) aconselha utilizar uma média entre os valores obtidos com as duas técnicas (Monte Carlo e experimental) para a determinação da constante de taxa de dose, pois cada uma tem as suas limitações e complementam-se.

5.2.2.3 Função geométrica, Função radial de dose e Função de anisotropia

A função geométrica $G_L(r, \theta)$, representa a variação de dose, devido à distribuição espacial da radioactividade no interior da fonte, ignorando os fotões de absorção e dispersão na fonte e a estrutura do meio envolvente, que são contabilizados por outras funções.

O papel da função de geometria é compensar a influência da lei do inverso do quadrado sobre a dose em torno da distribuição fonte [AAP95].

A função de geometria é definida como

$$G(r, \theta) = \frac{\int_V \frac{\rho(\vec{r}') dV'}{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}}{\int_V \rho(\vec{r}') dV'} \quad (5.8)$$

onde $\rho(r')$ representa a densidade de radioactividade no ponto $p(\vec{r}') = p(x', y', z')$ dentro da fonte e V é o volume de integração sobre o centro da fonte; dV' é o elemento de volume localizado na r' dentro da fonte. Quando a fonte pode ser aproximada por uma fonte pontual ou fonte em linha, $G(r, \theta)$ reduz-se a

$$G_p(r, \theta) = r^{-2} \quad \text{fonte pontual} \quad (5.9)$$

Para uma fonte em linha tem-se

$$G_L(r, \theta) = \frac{\beta}{Lr \sin \theta} \quad \text{para } \theta \neq 0 \quad (5.10)$$

$$G_L(r, \theta) = \frac{2 \tan^{-1}(L/2r)}{Lr} \quad \text{para } \theta = \pi/2 \quad (5.11)$$

$$G_L(r, \theta) = \frac{1}{r^2 - (L/2)^2} \quad \text{para } \theta = 0 \quad (5.12)$$

onde "P" corresponde à fonte pontual e "L" corresponde à aproximação da fonte em linha.

A função $g(r)$ é a função de dose radial e é uma quantidade adimensional. Esta aplica-se apenas ao eixo bissector transversal e é normalizada à unidade para $r=r_0$. A função é definida como

$$g_x(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)} \frac{G_X(r_0, \theta_0)}{G_X(r, \theta_0)} \quad (5.13)$$

Pode-se definir $g_P(r)$ para uma fonte pontual e $g_L(r)$ para uma fonte em linha.

$$g_P(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)} \cdot r^2 \quad (5.14)$$

$$g_L(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta_0)}{\dot{D}(r_0, \theta_0)} \cdot r \cdot \frac{\tan^{-1}(L/2)}{\tan^{-1}(L/2r)} \quad (5.15)$$

A função de dose radial é definida como a dose depositada ao longo do eixo bissector transversal devido à absorção e dispersão de fótons no meio. Também pode ser influenciado pela filtração de fótons na fonte e nos materiais encapsulamento.

A função $F(r, \theta)$ é a função de anisotropia e é uma quantidade adimensional. A função de anisotropia está normalizada à unidade ao longo do eixo bissector transversal, ou seja, para $\theta = \theta_0$, e para todos os valores de r . É definida como

$$F(r, \theta) = \frac{\dot{D}(r, \theta)}{\dot{D}(r, \theta_0)} \frac{G_L(r, \theta_0)}{G_X(r, \theta)} \quad (5.16)$$

Para uma fonte pontual a função de anisotropia reduz-se a $F_P(r) = 1$ e no caso de uma fonte em linha vem dada por

$$F_L(r) = \frac{\dot{D}(r, \theta)}{\dot{D}(r, \theta_0)} \cdot \frac{2 \tan^{-1}(L/2r) \cdot \sin \theta}{(\theta_2 - \theta_1)} \quad (5.17)$$

Esta função apresenta duas dimensões angulares da variação da taxa de dose em cada distância r (*em relação à origem*) devido à auto-filtração da fonte, filtração oblíqua de fótons primários através do material de encapsulamento e da absorção e dispersão de fótons no meio circundante.

A função de anisotropia é, por definição, igual à unidade, ao longo do eixo bissector transversal. Os valores de $F(r,\theta)$, ao longo do plano transversal, normalmente diminuem quando:

- (a) r diminui;
- (b) θ igual a 0° ou 180° ;
- (c) com o aumento da espessura do encapsulamento;
- (d) com a diminuição da energia do fotão.

Cada uma das quantidades acima descritas e utilizadas para calcular a taxa de dose absorvida no ponto (r,θ) são medidas ou calculadas para a fonte específica em questão e, portanto, depende construção e geometria da fonte, para além do espectro do fotão primário no meio circundante, que se assume ser água. No entanto, as perturbações resultantes da blindagem do aplicador da dose, atenuação intra-fonte e aplicador, e as variações na densidade do tecido e ainda da composição não são consideradas na maioria dos TPS[AAP95].

A actualização sugerida pelo LIBD diz respeito apenas à computação das distribuições de taxa de dose para fontes de braquiterapia intersticiais emisoras de fotões, ou seja, para fontes de I-125 e Pd-103. O protocolo de actualização inclui:

- a definição revista de intensidade de kerma em ar, S_K ;
- a eliminação da actividade aparente, A_{app} , para a especificação da intensidade da fonte;
- orientação sobre extrapolação do parâmetros tabelados no *Task Group 43* para distâncias mais longas e mais curtas, ou seja, a função radial de dose, $g(r)$, e da função de anisotropia, $F(r,\theta)$;
- correcção de pequenas inconsistências e omissões no protocolo original e sua implementação.

Tal como no protocolo publicado em 1995, é dado o formalismo de cálculo de dose tanto em 2D (fonte cilíndrica simétrica em linha) e 1D (fonte pontual). A fim de evitar interpretações incorrectas, as seguintes definições são utilizadas em todo o *TG43Update*:

- uma fonte é definida com qualquer material radioactivo encapsulado que pode ser utilizado para aplicações em BT, sem restrições quanto ao

tamanho ou simetria;

- uma fonte pontual é uma aproximação dosimétrica onde é assumido que a fonte se reduz a um ponto sem dimensões definidas com uma distribuição de dose esférica e simétrica a uma determinada distância radial r ;
- uma fonte em linha é uma aproximação dosimétrica na qual se assume que a radioactividade é distribuída uniformemente ao longo de uma linha com um segmento activo de comprimento L ;
- uma semente é definida como uma fonte de braquiterapia cilíndrica com um comprimento activo L , de comprimento activo eficaz, L_{eff} , inferior ou igual a 0.5 cm;
- o plano transversal de uma fonte cilíndrica simétrica é o plano perpendicular ao eixo longitudinal da fonte e corta a distribuição da radioactividade em dois [AAP04].

6 Simulação Monte Carlo em braquiterapia

O pacote Ulysses tem várias possibilidades de utilização, sendo uma das aplicações a simulação de sementes em braquiterapia. Neste caso estuda-se a aplicação de sementes de I-125 pois não há um estudo exaustivo de distribuições de dose desta fonte e os que existem usam outros códigos. No nosso caso o código usado é o sistema de Monte Carlo PENELOPE associado com o pacote de geometria Ulysses.

Para simular uma semente de I-125 começou-se por escolher a geometria pretendida.

As dimensões e estrutura da fonte *selectSeed* são apresentados na figura 6.1. O elemento activo é constituído de uma haste cilíndrica de prata com uma densidade de 10.5 g/cm^3 e com $3.40 \pm 0.05 \text{ mm}$ de comprimento e $0.51 \pm 0.02 \text{ mm}$ de diâmetro. É revestido com uma camada elementos radioactivos de prata ($\text{AgCl/AgI/Ag}^{125}\text{I}$) de $3 \pm 1 \text{ }\mu\text{m}$ de espessura. Este núcleo activo de prata é encapsulado num tubo oco de titânio com 4.51 g/cm^3 com $4.5 \pm 0.1 \text{ mm}$ de comprimento e de $0.80 \pm 0.04 \text{ mm}$ de diâmetro externo com uma espessura igual a $50 \text{ }\mu\text{m}$. [Kar01].

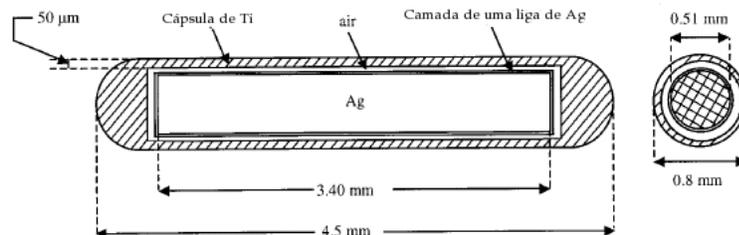


Figura 6.1 – Diagrama esquemático da geometria de uma fonte em semente de braquiterapia de I-125 *selectSeed*. [Kar01-2]

A simulação da semente da figura 6.1 foi feita usando o PENELOPE+Ulysses e foi desenvolvida por fases. Inicialmente definiu-se uma geometria básica e evoluiu-se na definição da geometria da fonte até finalmente se simular a semente por completo.

Optou-se por fazer esta simulação deste modo a fim de se compreender a influência de cada uma das componentes geométricas e físicas da semente no resultado das funções g_L e $F(r,\theta)$ e também para testar as várias potencialidades do novo pacote, ou seja, de forma a utilizar o maior número de rotinas internas possível.

A primeira fase de simulação foi feita usando uma semente cilíndrica simples com uma fonte em linha como esquematizada na figura 6.2. Esta semente com uma fonte em linha é descrita pelo relatório da AAPM de 2004 como a aproximação mais simples e correcta de uma semente com uma fonte cilíndrica [AAP04].

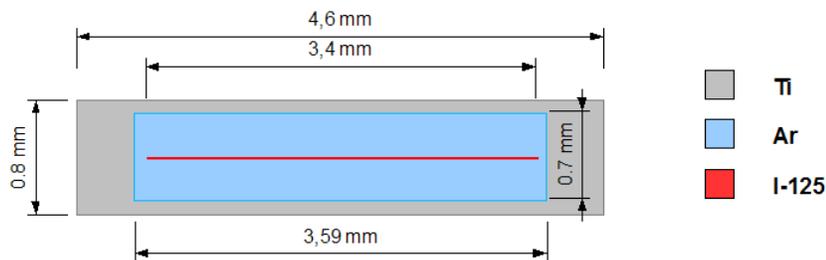


Figura 6.2 – Diagrama esquemático da geometria da fonte usada na simulação em linha.

Esta fonte foi simulada para 2 casos: para uma energia fixa de 30 keV (semente 1) e para o espectro de energias do I-125 (semente 2 - linha). Fazer a simulação para uma energia fixa facilitou numa primeira fase a execução da simulação e escolheu-se a energia de 30 keV pois a energia máxima do espectro do I-125 é cerca de 35.5 keV e os efeitos dos fótons na matéria são mais relevantes para energias maiores (o valor médio ponderado é cerca de 26 keV [AAP04]).

Em seguida foi simulada uma semente igual com excepção na forma da fonte, que em vez de ser uma linha está depositada sobre a superfície de um cilindro de ar com o mesmo comprimento que a linha. Neste caso foi usado todo o espectro de energias do I-125 (semente 3). O espectro de energia da fonte de I-125 está especificado na tabela 6.2. Para tornar a semente mais semelhante ao aspecto real transformaram-se as extremidades em meias esferas (semente 4).

Energia (keV)	Probabilidade
3.335	0.230
3.606	0.112
3.759	0.630
3.769	5.600
4.030	3.500
4.069	0.420
4.121	0.700
4.173	0.043
4.302	1.010
4.572	0.450
4.829	0.103
4.829	0.160
26.875	0.003
27.202	40.600
27.472	75.700
30.944	6.830
30.995	13.200
31.237	0.121
31.704	3.810
31.774	0.580
35.492	6.680

Tabela 6.1 – Espectro o I-125 [TOI].

Entretanto foi adicionado um cilindro de prata à semente 3 no qual esta depositado o I-125. Mais uma vez, foi considerado todo o espectro de energias do I-125 (semente 5).

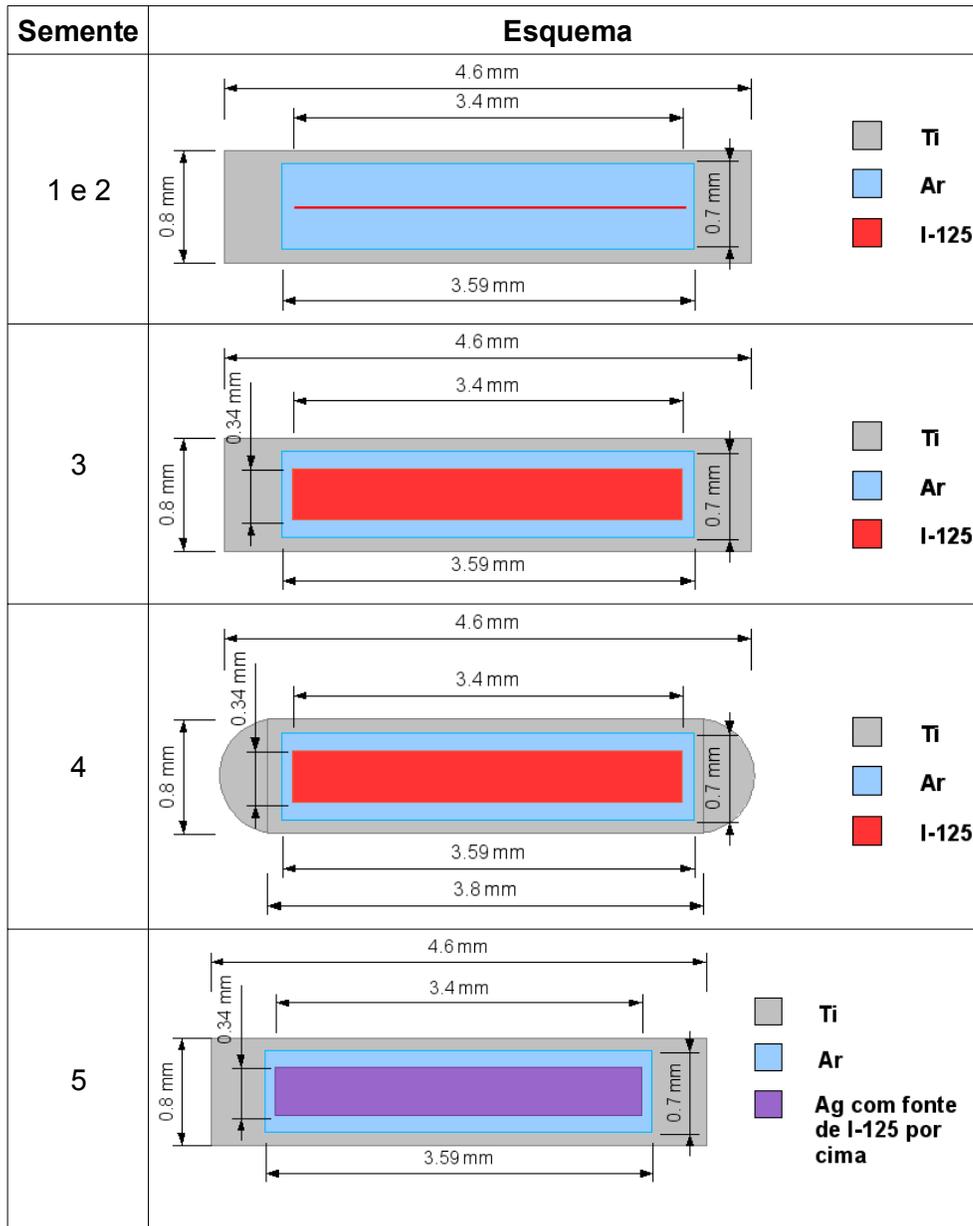


Tabela 6.2 – Diagrama esquemático das fontes nas várias fases.

De seguida simulou-se a semente completa com o depósito de I-125 (semente 6 - Ag).

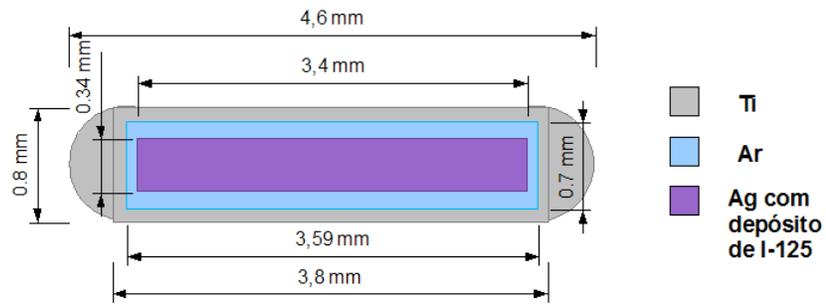


Figura 6.3 – Diagrama esquemático da geometria da fonte usada na simulação Ag – semente 6.

Finalmente simulou-se a semente com a fonte igual à representada na figura 6.1, com extremidades arredondadas (semente 7 - AgI).

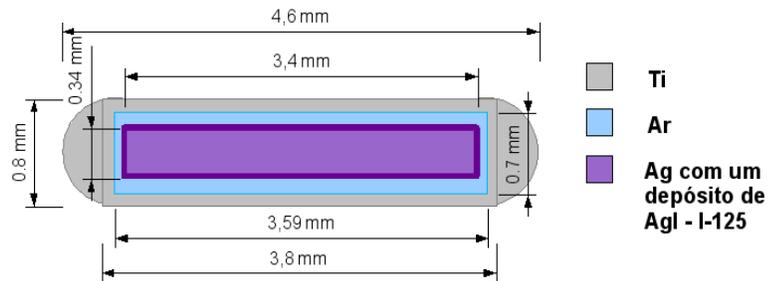


Figura 6.4 – Diagrama esquemático da geometria da fonte usada na simulação AgI – semente 7.

A figura 6.5 mostra o sistema de eixos local usado nas diversas simulações.

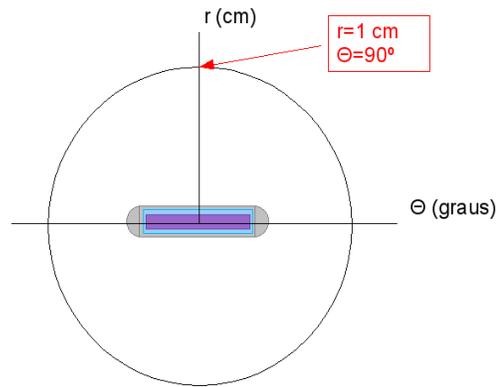


Figura 6.5 – Diagrama esquemático do referencial da posição da fonte

Das sementes testadas foram escolhidas as três que expressavam as maiores diferenças de estrutura, e foi então simulado para todos os esquemas de sementes a função $g(r)$, sendo no final comparados os resultados deste trabalho com dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05].

Foram escolhidos apenas alguns dos dados existentes pela sua semelhança no método de simulação ou por se tratarem de dados experimentais.

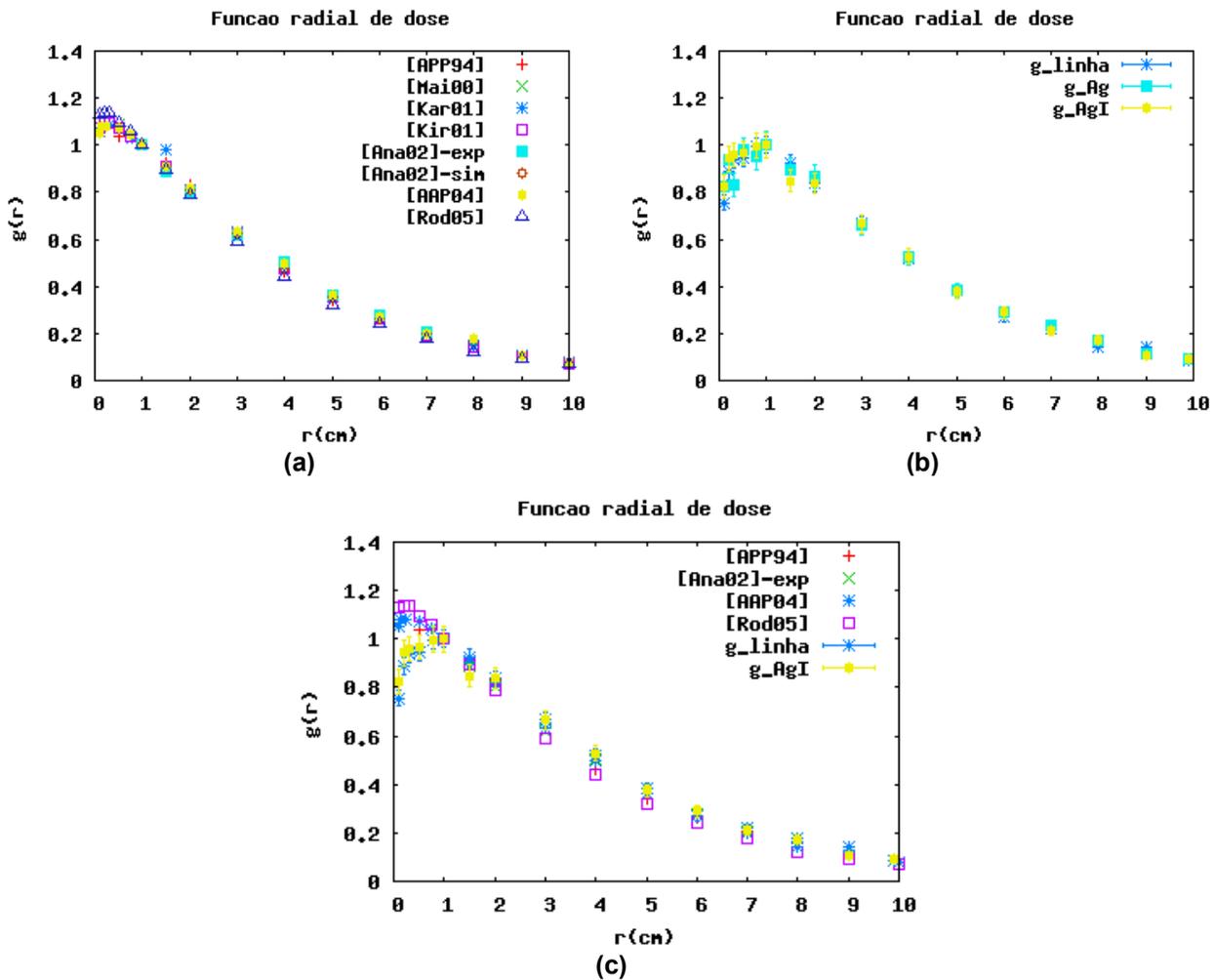


Figura 6.6 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados dos artigos escolhidos com os dados simulados.

Se compararmos os resultados documentados, podemos verificar que os valores são concordantes entre si, com exceção de uma ligeira diferença nos resultados do artigo publicado pela AAPM em 1994 para valores de dose medida a menos de 1 cm.

Em relação aos valores simulados neste trabalho pode-se observar que estão concordantes entre si apesar das diferenças entre as geometrias em questão.

Quando se comparam os valores PENELOPE+Ulysses com os de alguns dos artigos mencionados, verificamos que há uma diferença bastante visível para

valores radiais inferiores a 1cm.

Em quase todos os artigos mencionados, não há descrição completa e pormenorizada das sementes usadas quer para as várias simulações, quer nos ensaios experimentais. Nos artigos que descrevem devidamente a semente usada existem pequenas diferenças na sua constituição relativamente à semente simulada neste trabalho. Por exemplo, a semente usada por [Kar01] tem um depósito de uma liga de (AgCl/AgI/Ag¹²⁵I), enquanto a semente simulada neste trabalho tem apenas (AgI/Ag¹²⁵I). Outro exemplo de uma aproximação relevante para a simulação é a existência ou não de topos semi-esféricos na semente e as suas dimensões relativas.

Qualquer diferença na estrutura da semente, por pequena que seja, pode originar uma discrepância muito significativa a curtas distâncias, pois trata-se de um objecto de dimensões muito pequenas.

Num segundo passo foi simulada a função de anisotropia, $F(r,\theta)$, para cinco raios diferentes: 1cm (raio de referência), 2 cm, 3 cm, 4 cm e 5 cm.

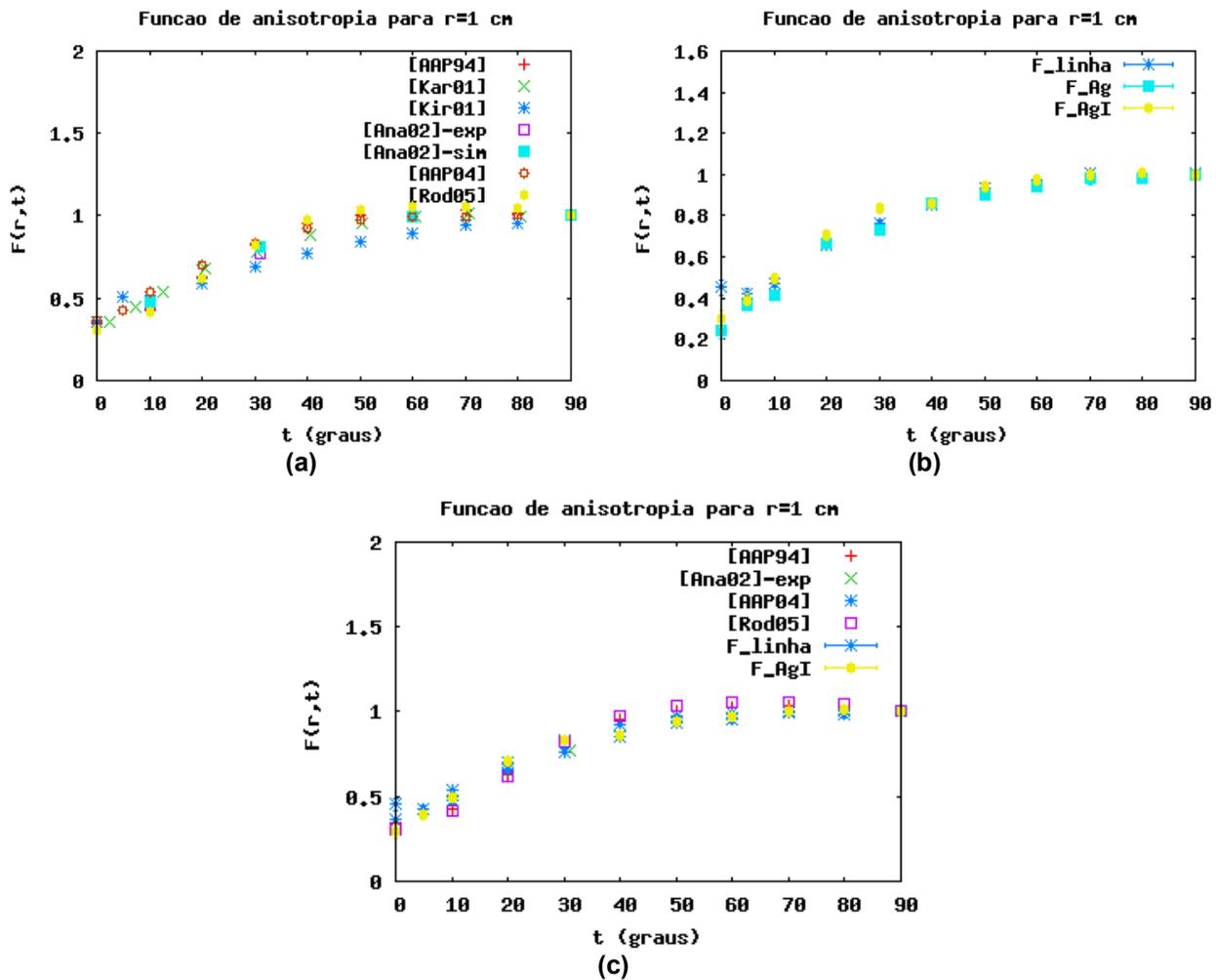


Figura 6.7 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados de alguns artigos com os dados simulados para r=1 cm.

Nos gráficos da figura 6.7 observam-se resultados da função de anisotropia da semente para o raio de referência.

Na comparação dos dados simulados com os publicados pode-se verificar que há um bom acordo entre os vários valores.

Nas figuras seguintes (6.8, 6.9, 6.10 e 6.11) estão representados os resultados obtidos, respectivamente, da função de anisotropia para distâncias à fonte de 2 cm, 3 cm, 4 cm e 5 cm.

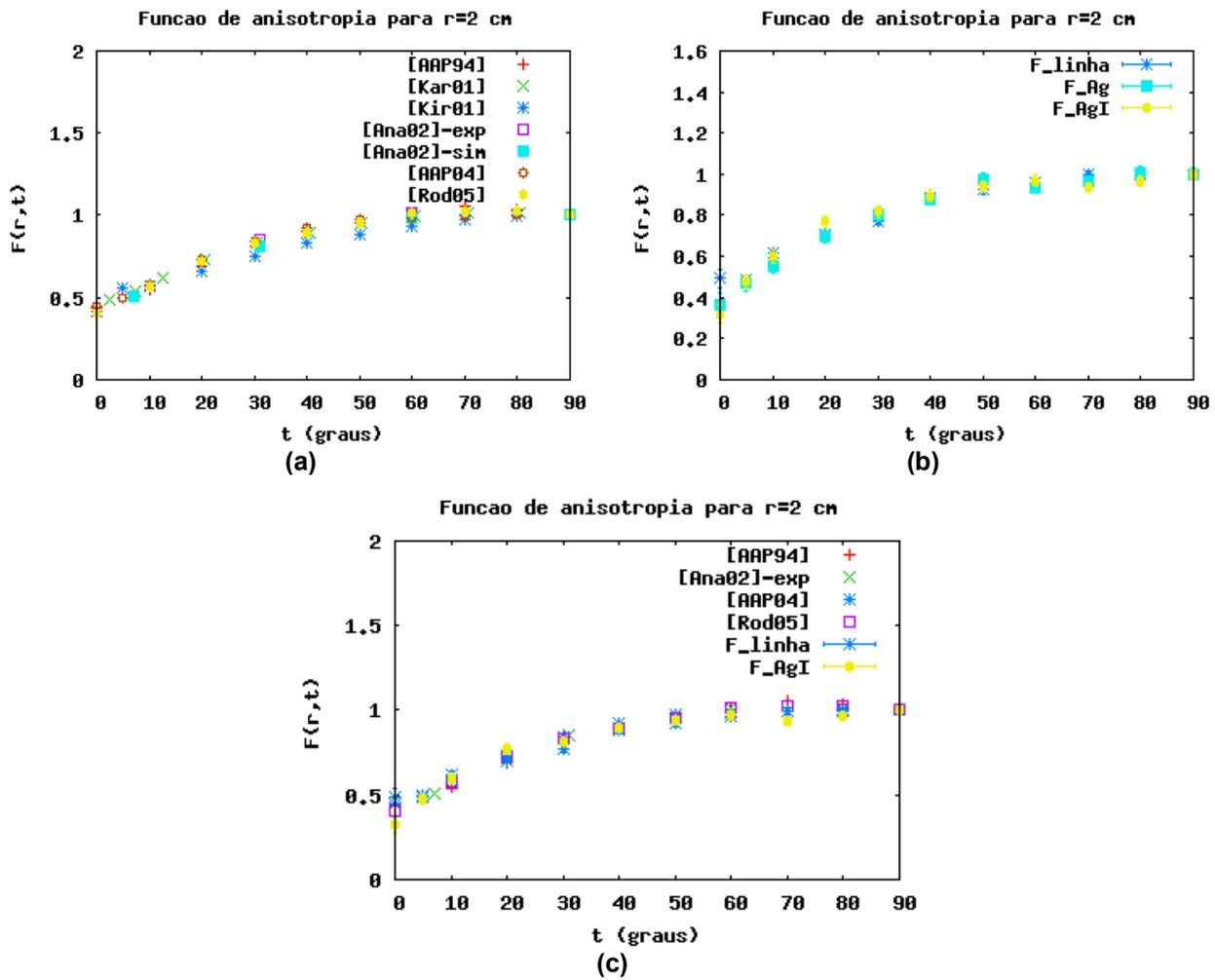


Figura 6.8 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados de alguns artigos com os dados simulados para $r=2$ cm.

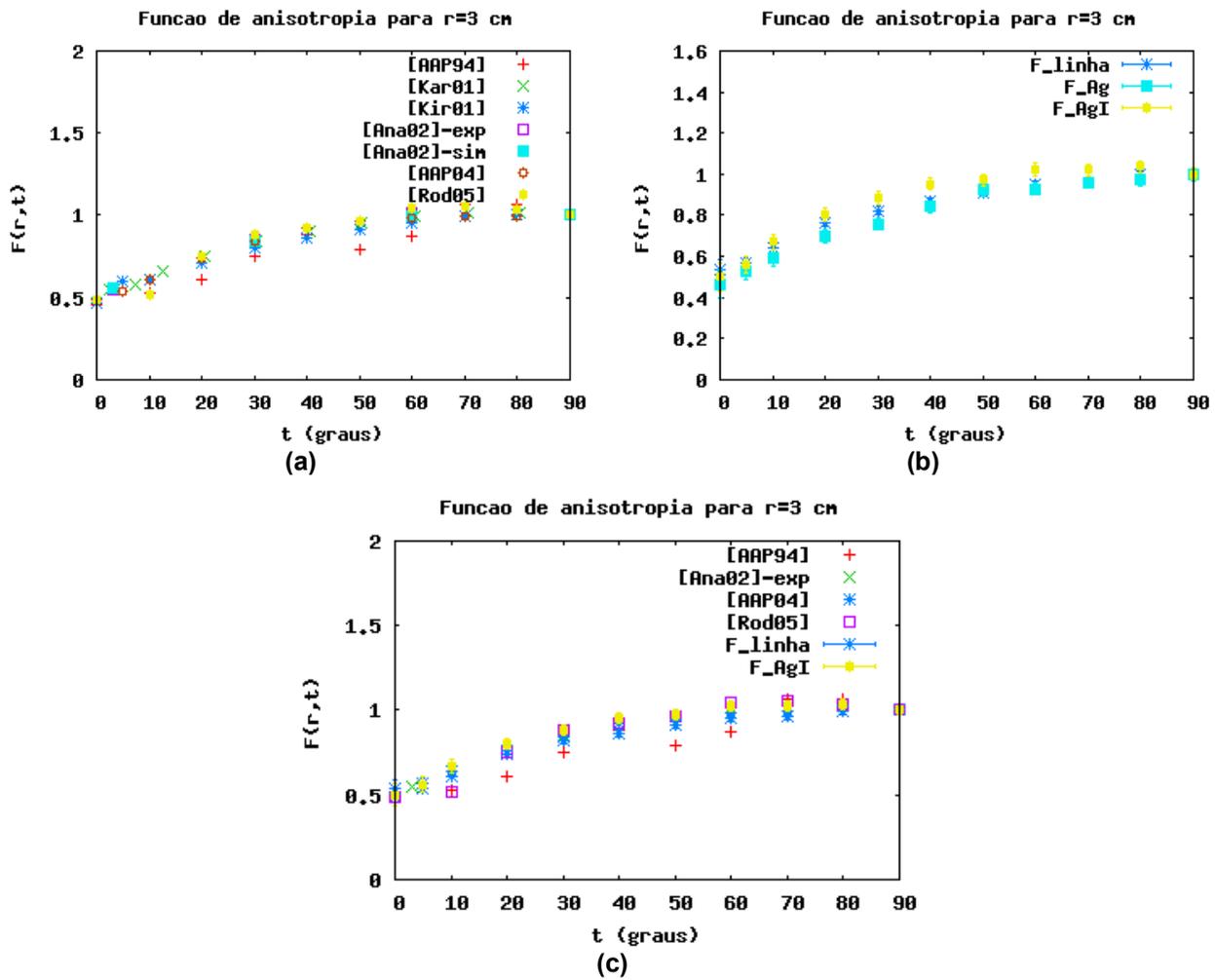


Figura 6.9 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados de alguns artigos com os dados simulados para $r=3$ cm.

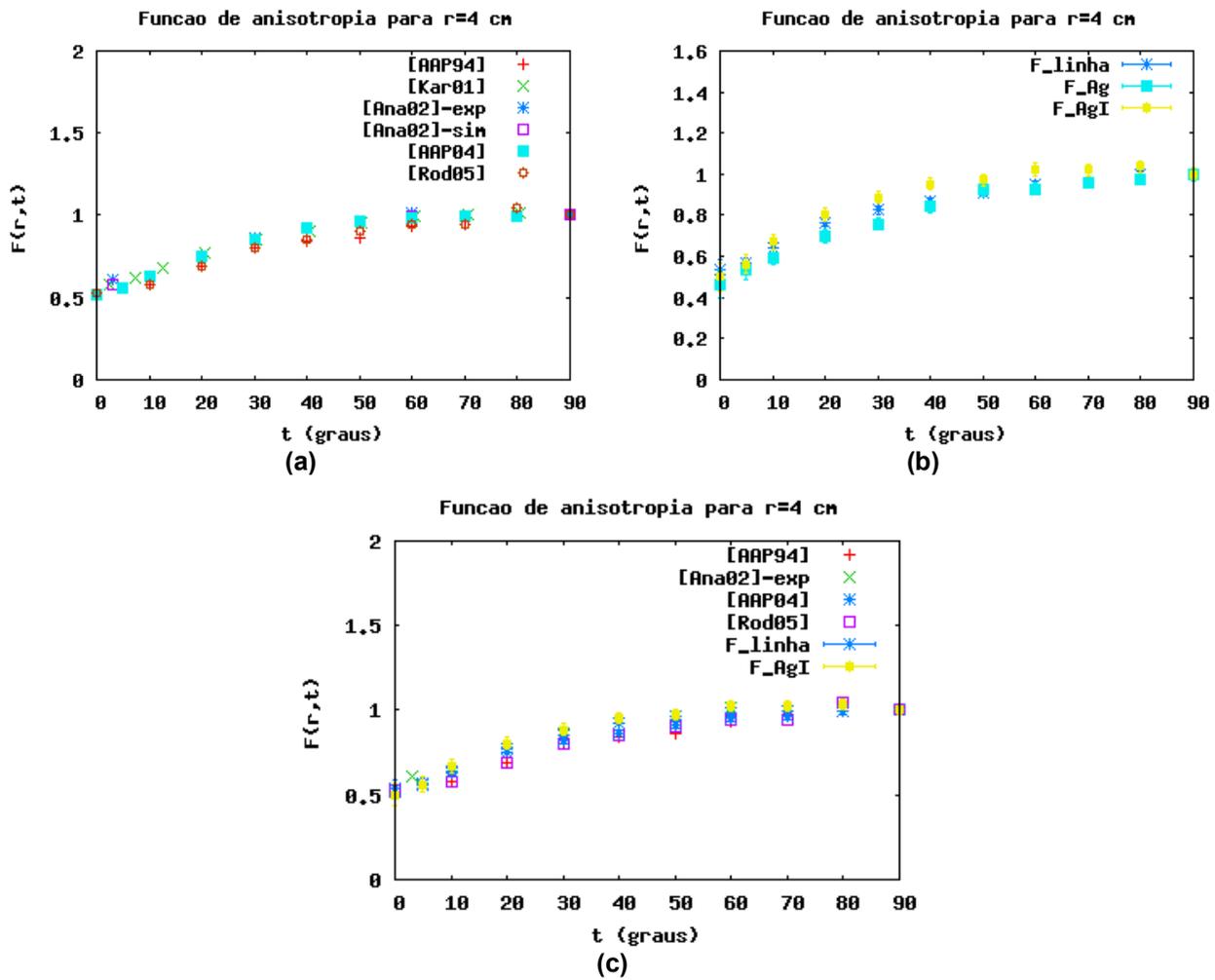


Figura 6.10 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados de alguns artigos com os dados simulados para $r=4$ cm.

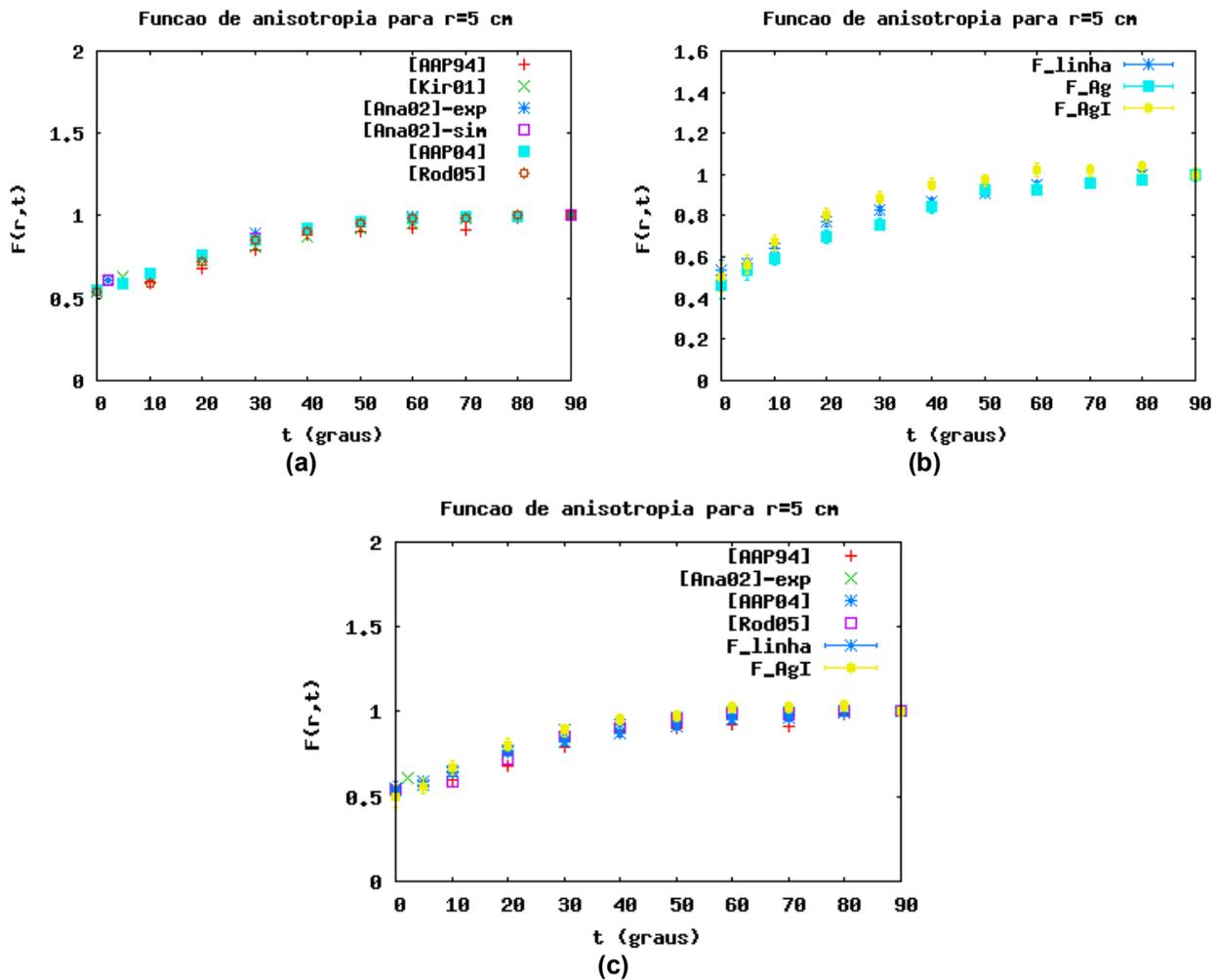


Figura 6.11 – (a)Dados retirados de trabalhos de vários autores [AAP94, Mai00, Kar01, Kir01, Ana02, AAP04, Rod05]; (b)Comparação dos resultados da simulação dos esquemas usados o pacote PENELOPE+Ulysses da função radial de dose; (c) Comparação dos dados de alguns artigos com os dados simulados para $r=5$ cm.

Comparando os vários resultados apresentados podemos verificar que a simulação feita neste trabalho está de acordo com os dados anteriormente publicados.

Pode-se observar dos gráficos nas figuras 6.7 a 6.11, que à medida que aumenta a distância à fonte a concordância dos dados com os valores já publicados é cada vez maior. Isto deve-se à relação da distância à fonte com o seu tamanho. A fonte tem um comprimento de cerca de meio centímetro e caso a anisotropia seja medida a 1cm da fonte quaisquer eventuais diferenças entre a

fonte simulada e a fonte real vão induzir a grandes discrepâncias nos resultados.

Com o aumento da distância à fonte, estas discrepâncias tornam-se cada vez menos relevantes.

Deve-se ainda salientar o facto de na simulação da fonte em linha, os resultados serem muito semelhantes aos resultados obtidos com a descrição da semente mais próxima da realidade, demonstrando que a aproximação descrita no relatório 43 da AAPM é bastante precisa.

7 Conclusões

Este trabalho foi desenvolvido com o objectivo de tornar um sistema de simulação de Monte Carlo mais simples e intuitivo para os utilizadores.

O pacote Ulysses, apresenta uma série de funcionalidades implementadas que possibilitam a construção de um número variado de simulações. Estas funcionalidades verificaram-se como tornando efectivamente a simulação mais simples e intuitiva, mantendo os resultados consistentes com outros autores.

Este trabalho é ainda um projecto em desenvolvimento, pelo que mais funcionalidades estão em desenvolvimento, tais como o seguimento de fótons ópticos. Esta funcionalidade não está presente no código PENELOPE original e poderá ser muito útil para simulações que envolvam fibras ópticas, um tema cada vez mais relevante em aplicações físicas.

Para testar as potencialidades deste pacote foram planeadas uma série de simulações de aplicação em física médica, tendo sido desenvolvidas uma série de simulações de sementes de I-125 usadas em braquiterapia. Foi então desenvolvido um estudo da influência da geometria das sementes na distribuição de dose radial e também um estudo da distribuição anisotrópica das mesmas, sendo estas grandezas muito importantes no planeamento de tratamentos de tumores. Os resultados destes estudos verificaram-se como estando em acordo com resultados já documentados, e confirmando a validade de aproximações efectuadas. As aplicações foram planeadas de forma a utilizar o máximo potencial do pacote desenvolvido, o qual se demonstrou muito eficaz.

Futuramente pretende-se alargar este estudo a outras sementes usadas em braquiterapia assim como a outras áreas da Física Médica.

Após este estudo pode-se verificar que a simulação com este pacote se mostrou fiável em comparação com dados publicados e que este novo pacote geométrico não só funciona como apresenta uma série de funcionalidades de fácil utilização devido não só à linguagem na qual foi desenvolvido este pacote como também na própria estrutura.

Referências

- [AAP87] AAPM, *“Specification of brachytherapy source strength: report of AAPM Task Group No. 32 AAPM Report 21”*, (New York: AIP), 1987
- [AAP91] AAPM, *“Clinical implementation of AAPM Task Group 32 recommendations on brachytherapy source strength specification”*, Med. Phys., 18 (1), 439-448, 1991
- [AAP93] AAPM, *“Remote afterloading technology: report of AAPM Task Group No. 41 AAPM Report 41”*, (New York: AIP), 1993
- [AAP95] AAPM, *“Dosimetry of interstitial brachytherapy sources: recommendations of the AAPM radiation therapy committee Task Group No. 43”*, Med. Phys., 22 (2), 209-234, 1995
- [AAP97] AAPM, *“Code of practice for brachytherapy physics: recommendations of the AAPM radiation therapy committee Task Group No. 56”*, Med. Phys., 24 (10), 1557-1598, 1997
- [AAP99] AAPM, *“Permanent prostate seed implant brachytherapy: Report of AAPM Task Group No. 64”*, Med. Phys., 26 (10), 2054-2450, 1997
- [AAP04] AAPM, *“Update of AAPM Task Group No. 43: A revised AAPM protocol for brachytherapy dose calculations”*, Med. Phys., 31 (3), 633-673, 2004
- [Air93] Aird E. G., Williams J. R., *“Brachytherapy”*, in Radiotherapy Physics, Williams J. R., Thwaites D. I., eds. Oxford University Press, pag 187-226, 1993
- [Ana02] Anagnostopoulos G. et al, *“Thermoluminescent dosimetry of the selectSeed 125I interstitial brachytherapy seed”*, Med. Phys., 29 (5), 709-716, 2002
- [And95-1] Anderson L. L., *“Dose specification and quantification of implant quality”* in Brachytherapy Physics - Williamson J. F., Thomadsen B. R., Nath R., Medical Physics Publishing, pag. 343-360, 1995
- [And95-2] Anderson L. L., Presser J. E., *“Classical systems I for temporary interstitial implants: Manchester and Quimby systems”* in Brachytherapy Physics - Williamson J. F., Thomadsen B. R., Nath R., Medical Physics Publishing, pag. 301-321, 1995
- [Att86] F.H.Attix, *“Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry”*, Wiley, New York, 1986.

- [BCR84] BCRU, “*Specification of brachytherapy sources*”, British Journal of Radiology, 57, 941-942, 1984
- [Bie00] Bielajew A. F., “*HOWFAR and HOWNEAR: geometry modelling for Monte Carlo particle transport*”, NRCC Report, PIRS-0341, 1995
- [Bie01] Bielajew A. F., “*Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport*”, Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, University of Michigan, 2001
- [Bra10] W.H.Bragg, “*Consequences of the corpuscular hypothesis of the gamma and x rays, and the ranges of the beta rays*”, Phil. Mag., 20, 385, 1910.
- [BRA] <http://www.revolutionhealth.com/conditions/breast-cancer/brachytherapy> (13/09/2008)
- [Ber82] M.J.Berger and S.M.Seltzer, “*Stopping Powers and Ranges of Electrons and Positrons*”, Report NBSIR 82-2550, National Bureau of Standards, Washington DC, 1982.
- [Ber88] Berger M. J., Seltzer S. M., capítulos 7, 8, 9, “*Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*”, Plenum, 1988
- [Boh03] Bohm T.D., DeLuca Jr. P.M., DeWerd L.A., “*Brachytherapy dosimetry of 125I and 103Pd sources using an updated cross section library for the MCNP Monte Carlo transport code*”, Med. Phy., 30 (4), 2003.
- [Bru86] Brun R. et al., “*GEANT3*”, Repost DD/EE/84-1, CERN, 1986
- [Bur87] Burns G. S. et all, “*Monte Carlo simulation of the dose distribution around 125I seeds*”, Med. Phy., 14 (3), 1987
- [Bur88] Burns G. S. et all, “*Two-dimensional dose distribution around a commercial 125I seeds*”, Med. Phy., 15 (1), 1988
- [CFM83] CFMRI, “*Recommandations pour la détermination des doses absorbées en curietherapie*”, Rapport CFMRI No. 1, Bureau National de Métrologie, 1983
- [Cha04] Chaves A. B., “*Monte Carlo Simulation Applied to Dosimetry of Narrow High-Energy Photon Beams used in Radiosurgery*”, FCUL, 2004
- [Chi90] Chiu-Tsao S. et all, “*Dose rate determination for 125I seeds*”, Med. Phy., 17 (5), 815-825, 1990
- [Cli85] Clifton C. et all, “*Two-dimensional dose distribution of 125I seeds*”, Med. Phy., 12 (5), 652-655, 1985
- [Cum02] Cumberlin R. L. et all, “*New directions in brachytherapy*”, Int. J.Radiation Oncology Biol. Phys., 53 (1), 6-11, 2002

- [Das98] Daskalov G. M. et al, "*Monte Carlo-aided dosimetry of a new high dose-rate brachytherapy*", Med. Phys., 25 (11), 2200-2208, 1998
- [Dee00] Deehan C., "*Brachytherapy into the new century*", In Physics and Engineering in Medicine in the New Millennium, Sharp P F and Perkins A C eds. (York: IPEM Publishing), 2000
- [Dug04] Duggan D. M., "*Improved radial dose function estimation using current version MCNP Monte-Carlo simulation: Model 6711 and 125I brachytherapy sources*", App. Rad. Iso., 61, 1443-1450, 2004
- [Eva55] Evans R. D., "*The atomic nucleus*", (New York: McGraw-Hill Book Company, Inc), 1995
- [Fra04] Frago M., "*Application of Monte Carlo Techniques for the Calculation of Accurate Brachytherapy Dose Distribution*", University of London, 2004
- [Gea95] Geant3 Manual, CERN, 1995
- [Gla98] Glasgow G. P., "*Isodose planning: brachytherapy*", in Treatment Planning in Radiation Oncology, Khan F. M., Potish R. A., eds. Williams & Wilkins, pag 243-280, 1998
- [God88] Godden T. J., "*Physical Aspects of Brachytherapy* ", Institute of Physics - Bristol, 1988
- [Gra29] L.H.Gray, "*Absorption of penetrating radiation*", in Proc. Roy. Soc. A - London, pag. 122-647, 1929.
- [Gre81] Greening J.R., "*Fundamentals of Radiation Dosimetry*", Adam Higler, Bristol, 1981.
- [Gre85] Greening J. R., "*Fundamentals of Radiation Dosimetry*", Medical Physics Handbooks,CRC Press, 2st edition,1985
- [Hal92] Halbleib et al., "*ITS version 3.0: the integrated TIGER series of coupled electron/photon Monte Carlo transport codes*", Report SAND91-1634, Sandia National Laboratories, 1992
- [Hbo93] Hbook manual, CERN, 1993
- [Hub79] Hubbell J. H., Øverbø I., "*Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross sections*", J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 69, 1979.

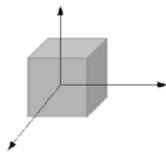
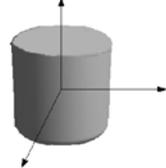
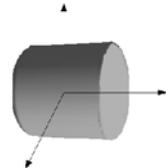
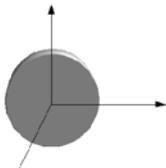
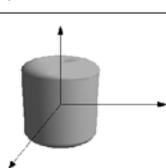
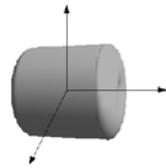
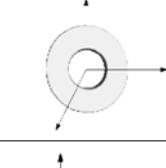
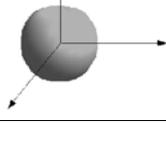
- [IAE00] *“Absorbed Dose Determination in External Beam Radiotherapy: An International Code of Practice for Dosimetry based on Standards of Absorbed Dose to Water”*, Technical Report Series 398, International Atomic Energy Agency, Vienna, 2000.
- [ICR84] *“Stopping Powers for Electrons and Positrons”*, ICRU Report 37, International Commission On Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1984.
- [ICR85] ICRU, *“Dose and volume specification for reporting intracavitary therapy”*, in gynecology, ICRU Report 38, ICRU, 1985
- [ICR90] ICWG, *“Interstitial brachytherapy: physical, biological, and clinical considerations”*, Anderson L. L., Nath R., Weaver K. A., eds. Raven, 1990
- [ICR98] ICRU, *“Dose and volume specification for reporting interstitial therapy”*, ICRU Report 58, ICRU, 1997
- [ICR99] ICRU, *“Prescribing, Recording and Reporting Photon Beam Therapy”*, ICRU Report 62, Supplement to ICRU Report 50, International Commission On Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1999.
- [ICW90] ICWG, *“Interstitial brachytherapy: physical, biological, and clinical considerations”*, Anderson L. L., Nath R., Weaver K. A., eds. Raven, 1990
- [Kar01-1] Kawrakow I., Rogers D. W. O., *“The EGSnrc code system: Monte Carlo simulation of electron and photon transport”*, NRCC Report PIRS-701, NRCC, 2001
- [Kar01-2] Karaiskos P., et all, *“Monte Carlo dosimetry of selectSeed 125I interstitial brachytherapy seed”*, Med. Phy., 28 (8), 2001
- [Kei89] Keith A. et all, *“Dose parameters of 125I and 192Ir seed sources”*, Med. Phy., 16 (4), 636-643, 1989
- [Kha84] Khan F. M., *“The Physics of Radiation Therapy”*, Edited by G. Stamathis, Pine J. W., Jadlos L., Williams & Wilkins, Baltimore, 1984.
- [Kha94] Khan F. M., *“The physics of radiation therapy”*, 2nd ed., Williams & Wilkins, 1994

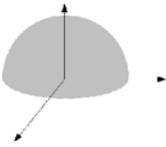
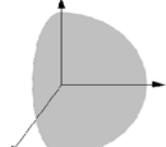
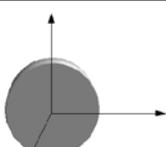
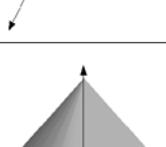
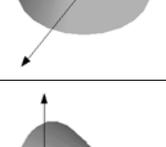
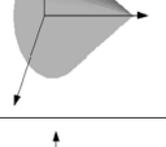
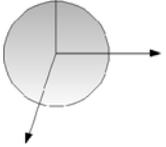
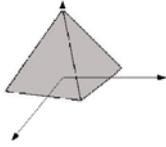
- [Kir01] Rodríguez A. V. et al, "Dosimetric parameters estimation using PENELOPE Monte-Carlo simulation code: Model 6711 a 125I brachytherapy seed", *App. Rad. Iso.*, 63 (1), 41-48, 2005
- [Kle29] Klein O., Nishina Y., "Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac", *Z. für Physik*, 52, 853–868, 1929.
- [Kle84] Klevenhagen S. C., "Electron Interactions with Matter", Chapter 2 in *Physics of Electron Beam Therapy*, Adam Hilher Ltd., pag. 37-66, 1984
- [Kno89] Knoll G. F., "Radiation interactions", Chapter 2 in *Radiation Detection and Measurement*, John Wiley & Sons, 2nd edition, pp 30-64, 1989.
- [Kra98] Krane, K.S., "Introductory Nuclear Physics", John Wiley & Sons, Inc. 1998
- [Leo86] Leo W. R., "Passage of Radiation Through Matter", Chapter 2 in *Techniques for Nuclear and Particles Physics Experiments*, Springer-Verlag, pp 17-63, 1986.
- [Mai00] Ernesto Mainegra et al, "Radial dose functions for 103Pd, 125I, 169Yb and 192Ir brachytherapy sources: an EGS4 Monte Carlo study", *Phys. Med. Biol.*, 45, 703-717, 2000
- [Mart98] Martel M. K., Narayana V., "Brachytherapy for the next century: use of image-based treatment planning", *Radiation Research*, 150, S178-S188, 1998
- [MATH] mathworld.wolfram.com/ (13/09/2008)
- [Nel85] Nelson W. R. et al., "The EGS4 code system", SLAC Report 265, SLAC, 1985
- [Par05] Parker W., Patrocinio H., "Clinical Treatment planning in external photonbeam radiotherapy" in *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*, IAEA, 2005
- [Per08] Aulas de "Dosimetria e protecção radiológica", FCUL, 2008
- [Rad07] http://mesothelioma-treatment-ways.blogspot.com/2007_10_01_archive.html (13/09/2008)
- [Rav90] Ravinder N., et al, "Dosimetry on transverse axes of 125I and 192Ir interstitial brachytherapy sources", *Med. Phy.*, 17 (6), 1032-1040, 1990
- [Rav93] Ravinder N., et al, "Anisotropy functions for 103Pd, 125I, and 192Ir interstitial brachytherapy sources", *Med. Phy.*, 20 (5), 1465-1473, 1993

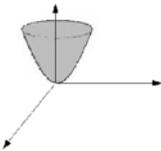
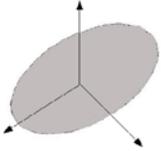
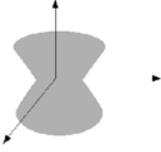
- [Rod05] Rodríguez E. A.V. Et al, "Dosimetric parameters estimation using PENELOPE Monte-Carlo simulation code: Model 6711 a 125I brachytherapy seed", 63 (1),41-48, 2005
- [Rut11] E.Rutherford, "*The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom*", Philos. Mag., 21, 669, 1911.
- [Sal03] F. Salvat et al., "*PENELOPE, a Monte Carlo Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*", OECD-NEA Data Bank, 2003
- [Soa07] Soares S., "*Simulação Monte Carlo do Campo de Radiação Produzido por um Acelerador Varian Clinac 600C usando Cunhas Dinâmicas*", FCUL, 2007
- [Sti97] Stitt J. A., Thomadsen B., "*Innovations and advances in brachytherapy*", Seminars in Oncology, 24 (6), 696-706, 1997
- [TOI] <http://nucleardata.nuclear.lu.se/nucleardata/toi/> (26/10/2008)
- [Tur95] Turner, J. E., "*Atoms, Radiation, and Radiation Protection*", Wiley, 1995
- [Wil00] Williams J. R., Thwaites D. , "*Radiotherapy Physics I*", Oxford University Press, pag. 247-288, 2000
- [Wil88-1] Williamson J. F., "*Monte Carlo evaluation of specific dose constants in water for 125I seeds*", Med. Phy., 15(5), 686-694, 1988
- [Wil88-2] Williamson J. F., "*Theoretical evaluation of dose distributions in water about models 6711 and 6702 125I seeds*", Med. Phy., 15(6), 891-897, 1988
- [Wil91] Williamson J. F., "*Comparison of measured and calculated dose rates in watre near I-125 and Ir-192 seeds*", Med. Phy., 18 (4), 776-786, 1991
- [Wil95] Williamson J. F., "*Recent developments in basic brachytherapy physics*", Radiation Therapy Physics, Smith A R ed. (New York: Springer-Verlag), 247-302, 1995
- [Wil02] Williamson J. F., "*Dosimetry characteristics of the DRAXIMAGE model LS-1 I-125 interstitial brachytherapy source design: A Monte Carlo investigation*", Med. Phy., 29 (4), 509-521, 2002

-
- [Wil05] Williamson J. F., *“Recommendations of the AAPM regarding the impact of Implementing the 2004 Task Group 43 report on Dose Specification for 103Pd and 125I Interstitial Brachytherapy”*, Med. Phys., 32 (5), 1424-1439, 2005
- [WikBuf] http://en.wikipedia.org/wiki/Buffon%27s_needle (19/10/2008)
- [WikEu] http://en.wikipedia.org/wiki/Euler_angles (13/09/2008)
- [WikMC] http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method (13/09/2008)
- [WikStu] http://en.wikipedia.org/wiki/Student%27s_t-distribution (19/10/2008)

Anexo A - Relação entre os volumes e os sub-tipos

Volume	Sub-tipo	Tipo	Esquema
Box	-	100	
Cylinder	Base in xy	200	
Cylinder	Base in yz	201	
Cylinder	Base in xz	202	
Tube	Base in xy	210	
Tube	Base in yz	211	
Tube	Base in xz	212	
Sphere	-	300	

Volume	Sub-tipo	Tipo	Esquema
Half-sphere	Base in xy	310	
Half-sphere	Base in yz	311	
Half-sphere	Base in xz	312	
Cone	Base in xy	400	
Cone	Base in yz	401	
Cone	Base in xz	402	
Pyramid	-	500	
Wedge	-	600	

Volume	Sub-tipo	Tipo	Esquema
Paraboloid	-	700	
Elipsoid	-	710	
Hyperboloid	-	720	
Torus	-	800	