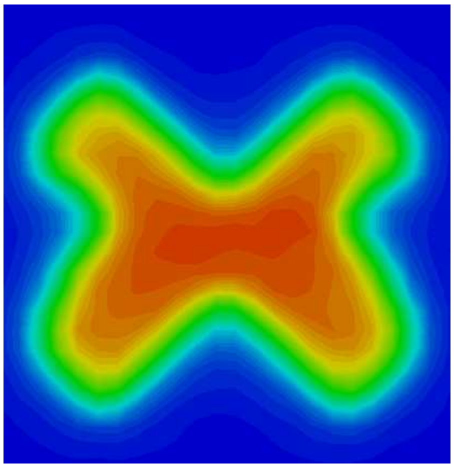
FACULDADE DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE DE LISBOA

Optimização do Cálculo de Dose por Simulação Monte Carlo em Radioterapia Externa com Feixes de Electrões



Andreia Maria Araújo Trindade

Orientador: Prof. Doutor Luis Peralta

Dissertação de Mestrado em Biofísica
Especialização em Física Médica e Engenharia Biomédica

Lisboa, 2002

Figura da capa: Representação em mapa térmico de uma distribuição de dose simulada por Monte Carlo produzida por um feixe de electrões para um campo de radiação irregular

Optimização do Cálculo de Dose por Simulação Monte Carlo em Radioterapia Externa com Feixes de Electrões

Andreia Maria Araújo Trindade

Lisboa, 2002

Tese realizada no LIP – Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas Lisboa, no âmbito dos projectos CERN/P/FIS/15174/1999, 40106/2000 e 43672/2001.

Aos meus Pais

"Don't we like to gamble? Isn't the very unpredictability of Monte Carlo output part of the appeal? Surely I am not the only Monte Carloist who gets excited when plotting a histogram. One watches the rise and fall off the values and tries to imagine a "smooth" curve going through them that confirms one's theory. Some interesting trend is discernible so one immediately runs more histories, dreaming of weekends of uninterrupted CPU time, if only one can wait that long. What analytical method can compare with that?"

A. E. Nahum, *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, 1989

Resumo

O objectivo desta tese consiste no estudo detalhado de feixes clínicos de electrões produzidos por aceleradores lineares e desenvolvimento e validação de um sistema de cálculo rápido de dose, baseado no método de Monte Carlo, para Radioterapia externa com feixes de electrões.

Os códigos de Monte Carlo EGS e GEANT foram utilizados para a simulação do acelerador linear Siemens Mevatron KD2, tendo-se obtido espaços de fases para os feixes de energia nominal 6, 8, 10, 12, 15 e 18 MeV. A sua validação dosimétrica foi efectuada por comparação de distribuições de dose calculadas num *fantoma* homogéneo de água com resultados experimentais com um acordo a menos de 1.5% / 2 mm. Um modelo multi–fontes foi utilizado para reconstrução/geração de espaços de fases dosimetricamente equivalentes aos obtidos por simulação Monte Carlo "completa", representativos das diferentes configurações de feixes de electrões do acelerador Siemens KD2 e de outros aceleradores lineares no mesmo modo de tratamento. O modelo multi–fontes permitiu a compactação dos espaços de fases por um factor na ordem de 350 e uma redução de tempo de CPU necessário para a simulação do acelerador por um factor na ordem de 7500.

A optimização do processo de cálculo de dose foi efectuada por adaptação do modelo multi–fontes ao algoritmo de Monte Carlo DPM. Um acordo a menos de 2% dos resultados experimentais e da simulação Monte Carlo "completa" foi encontrado no cálculo de grandezas dosimétricas e distribuições de dose em *fantomas* homogéneos e heterogéneos. O tempo de cálculo médio, para uma incerteza estatística de 1%, em geometrias arbitrárias é de aproximadamente 80 segundos, representando um ganho de eficiência de duas ordens de grandeza relativamente à simulação Monte Carlo "completa" compatível com uma possível futura implementação clínica.

Palavras chave: Simulação Monte Carlo, Radioterapia, Feixes de electrões

Abstract

The purpose of this study is to improve the understanding of clinical electron beams and to use this information for the development and validation of a fast dose Monte Carlo calculation engine for external electron beam Radiotherapy.

The Monte Carlo codes EGS and GEANT has been used to simulate electron beams from a Siemens Mevatron KD2 linear accelerator at 6, 8, 10, 12, 15 e 18 MeV nominal beam energies. Dose distributions calculated in a water phantom agree within 1.5% / 2 mm with experimental data. A multiple–source model was used to reconstruct dosimetric equivalent phase space data to the ones obtained by full Monte Carlo simulation. The model allows the reconstruction of several electron phase space data for Siemens KD2 and others similar accelerators. The multiple–source model reduced the phase space data storage requirement by a factor of the order of 350 and the accelerator simulation CPU time by a factor of the order of 7500.

The developed multiple–source model was interface with DPM, a fast dedicated Monte Carlo code for dose calculation optimization. Dose distributions in homogeneous and heterogeneous phantoms and dosimetric parameters calculated with this system agrees within 2% with full Monte Carlo and experimental data. For arbitrary geometries, mean CPU time for 1% statistical uncertainty was about 80 seconds. A two order of magnitude efficiency gain, in comparison with full Monte Carlo, was obtained which is compatible with a future clinical implementation.

Key words: Monte Carlo simulation, Radiotherapy, Electron beams

Agradecimentos

Agradeço ao Professor Luis Peralta, por me ter dado a oportunidade de desenvolver este trabalho, acompanhando-o e apoiando-o ao longo de mais de dois anos. Pela sua disponibilidade, preciosas sugestões e alegres momentos de aprendizagem o meu sincero obrigado.

Ao Pedro Rodrigues um especial agradecimento, pelo apoio dedicado que sempre me dispensou durante o decorrer de todo o trabalho, entusiasmo, encorajamento e incansáveis discussões. A sua contribuição foi sem dúvida fundamental para a realização desta tese.

Agradeço à Doutora Maria do Carmo Lopes do Instituto Português de Oncologia Francisco Gentil do Centro Regional de Oncologia de Coimbra – IPOFG CROC – pela disponibilidade para a realização das medições experimentais apresentadas neste trabalho, e ao Eng. Adérito Chaves, Eng. Carla Alves e Dra. Raquel Paiva, que colaboraram na sua aquisição. Ao Doutor Carlos Oliveira do Instituto Tecnológico e Nuclear – ITN – que colaborou neste projecto, permitindo a comparação dos resultados de simulação com o código MCNP, e pelas interessantes discussões que se porporcionaram.

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 CERN/P/FIS/15174/1999, 40106/2000 e 43672/2001. A todos os colegas do LIP cuja colaboração, de alguma forma, contribuiu para a concretização deste trabalho, os meus agradecimentos.

Aos meus Pais, agradeço toda a compreensão, apoio e os seus bons conselhos. Agradeço ainda a todos aqueles, familiares e amigos, que me ajudaram com a sua amizade. Ao Pedro, sempre.

Nota

Nos Capítulos 3 e 4 da presente tese, é apresentada informação técnica relativa à cabeça de tratamento do acelerador Siemens Mevatron KD2. Esta informação é propriedade da Siemens AG Medical Engineering, não podendo ser utilizada fora do âmbito desta tese sem consentimento prévio.

Technical information regarding the Siemens Mevatron KD2 linear accelerator treatment head is presented in Chapters 3 and 4. This information is propriety of Siemens AG Medical Engineering, and cannot be used outside this thesis without previous consent.

Índice

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Introdução

O avanço tecnológico verificado nas últimas décadas, permitiu um aumento da capacidade de cálculo e diminuição dos custos associados aos sistemas computacionais, tornando o método de Monte Carlo uma técnica comum em diversas áreas de investigação em particular nas aplicações à Medicina envolvendo radiação ionizante. Em Radioterapia, a simulação Monte Carlo é considerada a abordagem mais precisa para a previsão de distribuições de dose absorvida em tecidos biológicos e no estudo da resposta de detectores de radiação em dosimetria.

As primeiras aplicações do método de Monte Carlo à Radioterapia consistiram na simulação de feixes de radiação produzidos por aceleradores lineares clínicos, no final dos anos 70. O método revelou-se de extrema importância para a modelação de feixes de electrões devido à inexistência de modelos analíticos satisfatórios para a descrição da sua interacção com a matéria. Essencialmente devido a limitações de recursos computacionais e à utilização de códigos de Monte Carlo não optimizados para a gama de energias terapêuticas, a simulação completa de um acelerador linear representava um difícil desafio. As simulações eram realizadas recorrendo a simplificações da geometria, por selecção das componentes consideradas dosimetricamente relevantes, focando o objectivo dos estudos na influência destas na caracterização do feixe de electrões e nas distribuições de dose calculadas. Na década seguinte, o desenvolvimento de códigos mais sofisticados e flexíveis permitiu a sistematização da simulação completa de aceleradores lineares de diferentes arquitecturas, desencadeando uma série de estudos visando a obtenção de informação detalhada das várias configurações de feixe disponíveis acompanhada por uma maior precisão no cálculo de dose. O acordo encontrado entre as distribuições de dose calculadas em *fantomas* simples e dados experimentais foi excelente, constatando-se as potencialidades do método de Monte Carlo para uma implementação clínica.

Diversos grupos de investigação, motivados pelo conhecimento das limitações dos algorítmos de cálculo de dose comerciais disponíveis para Radioterapia, trabalharam activamente no desenvolvimento de um sistema de planeamento baseado em Monte Carlo, avaliando os diferentes aspectos do processo de implementação e validação. O principal obstáculo encontrado à sua aplicação sistemática consiste nos elevados tempos de execução das simulações requeridos para a obtenção de incertezas estatísticas estabelecidas como clinicamente aceitáveis. De modo geral, assumindo que todos os recursos computacionais existentes numa unidade de Radioterapia, poderiam ser agrupados numa única estrutura de processamento em paralelo, o tempo de cálculo necessário para um planeamento de tratamento com feixes de electrões para uma precisão de 2%, seria ainda incompatível com a rotina clínica. Estas questões marcaram o início de uma nova vertente de investigação, a optimização do método de simulação por Monte Carlo.

Diferentes abordagens têm sido adoptadas para a optimização do processo de geração de espaços de fases e cálculo de dose em geometrias antropomórficas. Uma das primeiras metodologias desenvolvidas consiste na aquisição prévia de espaços de fases relativos à simulação das componentes do acelerador independentes das especificações do tratamento. Esta informação é utilizada numa fase posterior para o cálculo das distribuições de dose na geometria, envolvendo a simulação dos dispositivos de colimação adicionais específicos do planeamento. Esta divisão permite uma redução no tempo de execução do planeamento por um factor de 4–6, embora a necessidade de armazenamento de ficheiros espaço de fases representativos das diferentes configurações de feixe com dimensões da ordem dos *Gigabyte* represente uma desvantagem. Paralelamente a esta abordagem têm surgido modelos de resconstrução rápida de espaços de fases através de uma representação simplificada das características dos feixes de electrões produzidos pelos aceleradores lineares. Estes modelos permitem uma redução considerável do tempo de simulação, associado a uma diminuição do espaço requerido para armazenamento em disco. Estudos comparativos de distribuições de dose simuladas a partir de espaços de fases reconstruidos e originais, obtidos por simulação “completa” de Monte Carlo, indicam que estes modelos rápidos são uma alternativa viável e de fácil manipulação tendo em vista uma futura implementação de um sistema de cálculo de dose em unidades de Radioterapia. Nos últimos três anos e de modo a tirar partido destes modelos de reconstrução/geração de espaços de fases, foram realizados investimentos no desenvolvimento de novos códigos de simulação significativamente mais rápidos para o cálculo de dose. Estes códigos incorporam novas formulações da descrição dos processos físicos na gama de energias terapêuticas e mecanismos de transporte optimizados através de geometrias antropomórficas contendo um elevado grau de heterogeneidades.

O trabalho apresentado nesta tese reporta ao desenvolvimento e estudo da optimização do cálculo de dose pelo método de Monte Carlo em Radioterapia com feixes de electrões. A simulação detalhada de espaços de fases de um acelerador linear, derivação de um modelo rápido de reconstrução/geração de espaços de fases e a sua implementação num código de Monte Carlo optimizado, são apresentados nos seguintes capítulos:

No **capítulo 1** são descritos os fundamentos físicos dos principais mecanismos de interacção da radiação electromagnética ionizante com a matéria e estabelecidos conceitos de dosimetria básica em Radioterapia externa, necessários para a caracterização de feixes clínicos de electrões produzidos por aceleradores lineares. O método de Monte Carlo para simulação do transporte de radiação e os aspectos mais relevantes dos códigos de Monte Carlo utilizados no decorrer deste trabalho são apresentados no **capítulo 2**.

O processo de simulação de feixes de electrões produzidos por um acelerador linear Siemens Mevatron KD2 com os códigos EGS e GEANT é apresentado no **capítulo 3**. Para uma configuração de referência, foi realizada a caracterização do feixe ao nível das principais estruturas constituintes do acelerador e a avaliação dos diferentes modelos físicos incorporados em cada código de simulação. Espaços de fases representativos das várias energias do acelerador Siemens KD2 para o campo de radiação 10×10 cm^2 foram posteriormente gerados e validados com dados experimentais num *fantoma* homogéneo de água.

O desenvolvimento do sistema rápido de cálculo de dose é descrito nos **capítulos 4** e **5**. A construção de um modelo multi–fontes para o acelerador Siemens KD2 permitiu optimizar o tempo de CPU para o processo simulação das várias configurações de feixe reduzindo simultaneamente o espaço de armazenamento em disco dos ficheiros de espaços de fases, mantendo o nível de precisão de Monte Carlo. Os presupostos de base deste modelo permitiram a sua extensão à modelação de feixes de electrões de outros aceleradores lineares com base em parâmetros experimentais eliminando a necessidade do conhecimento da geometria e sua codificação. A metodologia descrita no **capítulo 4** é facilmente adaptada a qualquer acelerador linear e suficientemente abrangente para a sua aplicação à modelação de feixes clínicos de fotões. O ganho de eficiência obtido com o modelo multi–fontes é, no entanto, comprometido pelo elevado tempo de CPU necessário à simulação de distribuições de dose pelos denominados códigos *generalistas*. Tal, motivou a adaptação do modelo multi–fontes ao algoritmo de transporte *dedicado* DPM, optimizado para aplicações de cálculo de dose em Radioterapia.

No **capítulo 5** é elaborada uma avaliação do desempenho do código DPM acoplado ao modelo multi–fontes, como sistema de cálculo rápido de dose em aplicações dosimétricas com interesse clínico. Distribuições de dose simuladas pelo sistema em *fantomas* homogéneos foram comparadas com resultados de GEANT3 e com um sistema de planeamento comercial, utilizado actualmente nas unidades de Radioterapia. A precisão e eficiência do sistema para cálculo de dose em *fantomas* heterogéneos e em diferentes condições de irradiação são também efectuadas. A análise dos ganhos computacionais do sistema e as perspectivas da sua utilização como meio de verificação de sistemas de planeamento e de cálculo rápido e preciso de parâmetros dosimétricos de feixes de electrões na rotina clínica, são discutidas no final do capítulo.

Capítulo 1

Feixes de Electrões para Aplicações Clínicas

A Radioterapia externa com feixes de electrões de elevada energia, tornou-se uma modalidade de tratamento de doenças oncológicas comum em 1970, após se ter aliado o conhecimento dos mecanismos de interacção com tecidos biológicos e respectiva dosimetria com o desenvolvimento e disponibilização de aceleradores lineares de electrões para uso clínico. As características dosimétricas dos feixes de electrões permitem distribuições de dose uniformes com um elevado grau de conformação nas camadas superficiais dos tecidos, apresentando uma diminuição acentuada da dose para profundidades superiores. Deste modo, estes feixes são preferencialmente escolhidos para tratamentos de tumores superficiais, localizados a profundidades inferiores a 6–7 cm [Khan, 1984], proporcionando uma maior taxa de sucesso em comparação com feixes de raios-X, associada a uma menor probabilidade de indução de lesões secundárias em tecidos saudáveis.

Os feixes de electrões são produzidos por aceleradores lineares clínicos uma gama de energias compreendida entre 4 e 20 MeV, sendo geralmente utilizado um único campo de tratamento ou vários campos adjacentes para irradiação de lesões extensas. As principais aplicações terapêuticas em Radioterapia são o tratamento do cancro de lábio e pele bem como a irradiação de cicatrizes [Klevenhagen, 1985]. O modo de tratamento com electrões, é frequentemente escolhido como modalidade complementar à terapia com feixes de fotões, através da distribuição de dose suplementar em áreas bem localizadas como nódulos mamários internos e tumores na região cabeça–pescoço.

1.1 Interacção dos Electrões com a Matéria

Em oposição aos fotões que podem percorrer grandes distâncias num meio material sem interagirem e depositarem a sua energia, as partículas carregadas, em particular os electrões, perdem a sua energia de forma quase contínua. Tal deve-se à elevada probabilidade ou secção eficaz de interacção dos electrões com núcleos e electrões orbitais da matéria devido ao campo de Coulomb. O conhecimento dos mecanismos de interacção dos electrões têm especial importância em dosimetria, dado que são estes os responsáveis pela deposição da energia num meio absorvedor. Os três principais modos ou processos de interacção são: dispersões inelásticas por colisão com electrões orbitais, dispersões inelásticas radiativas no campo de Coulomb dos núcleos e electrões orbitais e dispersões elásticas atómicas, que deflectem a trajectória do electrão incidente sem, no entanto, contribuir significativamente para perdas de energia.

1.1.1 Dispersões Inelásticas

A interacção dos electrões por dispersão inelástica com electrões orbitais, resulta na excitação e ionização dos átomos do meio material. No processo de excitação a transferência de energia por colisão é da ordem das dezenas de eV, permitindo a promoção de electrões das orbitais exteriores a níveis de energia superiores.

$$e^- \ Atomo \ \rightarrow \ e^- \ Atomo^{\,*}$$

No processo de ionização, também designado por dispersão de Møller ou colisão electrão–electrão, a energia cinética do electrão incidente transferida durante a colisão é suficiente para ejectar um electrão atómico.

$$e^- \ e^- \ \rightarrow \ e^- \ e^-$$

Estes electrões secundários, designados por raios–δ, induzem novos processos de excitação e ionização no material, apresentando uma energia mais provável em água de 100 eV [Klevenhagen, 1985]. Na gama de energias relativistas, $E_0 \gg m_e c^2$, a probabilidade de produção de um electrão secundário de energia cinética T num material com número atómico Z é descrita pela secção eficaz diferencial de Møller [Fernow, 1986]:

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{2\pi r_e^2 Z}{\beta^2(\gamma-1)}\left[\frac{(\gamma-1)^2}{\gamma^2} + \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{2\gamma-1}{\gamma^2}\right) + \frac{1}{1-\epsilon}\left(\frac{1}{1-\epsilon} - \frac{2\gamma-1}{\gamma^2}\right)\right] \quad (1.1)$$

onde $\gamma = \frac{E_0}{m_e c^2}$, $\beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2}$, $\epsilon = \frac{T}{E_0 - m_e c^2}$, r_e é o raio clássico do electrão, m_e a massa do electrão e Z é o número atómico do material. Esta relação é válida nas condições em que o electrão atómico é considerado livre, sendo menos adequada para o tratamento de dispersão inelástica para energias do electrão incidente na ordem do limiar de ionização e excitação atómica [Salvat, 2000]. A remoção de electrões das camadas mais internas (K e L) do átomo, conduz à presença de um estado excitado. Nos estados finais da excitação e ionização, a desexcitação do núcleo dá-se com o rearranjo dos electrões orbitais ocorrendo a emissão de radiação–X característica ou a ejecção de electrões de Auger e Coster–Kronig. Os processos de excitação e ionização são os principais mecanismos de perda de energia para electrões incidentes da ordem dos MeV, que corresponde à gama de energias presentes nos tratamentos de Radioterapia. Devido à pequena massa dos electrões, estes interactuam com núcleos do meio material por dipersões inelásticas radiativas. Na presença do campo electromagnético nuclear os electrões são desacelerados, sendo uma fracção da sua energia cinética inicial emitida sob a forma de fotões de travagem, também designados por *bremsstrahlung*:

$$e^- \; N \;\rightarrow\; e^- \; N \; \gamma$$

Para energias relativistas, a probabilidade de emissão de fotões de *bremsstrahlung* com momento k por um electrão de energia total E_0 é dada pela fórmula de Bethe–Heitler corrigida (notação de Koch e Motz – equação 3CS) correspondente à integração da secção eficaz diferencial nas direcções de emissão do electrão e do fotão [Koch and Motz, 1959]:

$$\frac{d\sigma}{dk} = \frac{4Z^2 r_e^2 \alpha}{k}\left\{(1+\epsilon^2)\left[\frac{\phi_1(\xi)}{4} - \frac{1}{3}lnZ - f(Z)\right] - \frac{2}{3}\epsilon\left[\frac{\phi_2(\xi)}{4} - \frac{1}{3}lnZ - f(Z)\right]\right\} \quad (1.2)$$

onde, $\epsilon = \frac{E}{E_0}$ sendo E a energia total do electrão disperso, $\alpha = \frac{1}{137}$ é a constante de estrutura fina, r_e é o raio clássico do electrão e $f(Z)$ é o factor de correcção de Coulomb à aproximação de Born ($\beta \gg \alpha Z$), que descreve a interacção de

Coulomb do electrão emitido com o campo eléctrico do núcleo. Esta correcção é necessária dado que a aproximação de Born torna-se menos precisa para materiais de elevado número atómico, baixas energias do electrão incidente e para energias do fotão no limite de elevadas frequências. $\phi_1(\xi)$ e $\phi_2(\xi)$ são funções de correcção da secção eficaz para contabilização do efeito de blindagem da carga eléctrica nuclear devido à presença dos electrões orbitais – efeito de *screening* – parametrizável pela quantidade:

$$\xi = \frac{100\ m_e c^2 k}{E_0\ E\ Z^{1/3}} \tag{1.3}$$

As funções de correcção são obtidas pela integração de factores de forma atómicos calculados segundo os modelos de Thomas–Fermi ($Z \geq 6$) ou de Hartree–Fock ($1 \leq Z \leq 6$) [Seltzer and Berger, 1985]. A interacção do electrão incidente com o campo de electrões atómicos também conduz à produção de *bremsstrahlung* por dispersão electrão–electrão. No entanto, a secção eficaz deste processo é proporcional a Z tornando-se relevante somente para materiais com baixo número atómico e energias do electrão incidente ultra–relativistas. A sua contribuição pode ser tomada em conta de forma aproximada por substituição da dependência em Z^2 por $Z(Z+1)$ na secção eficaz diferencial (1.2). Existem no entanto, diferenças entre as secções eficazes de *bremsstrahlung* electrão–electrão e electrão–núcleo: o efeito de blindagem do campo dos electrões orbitais difere do nuclear, pelo que os factores de forma devem ser alterados, no limite de elevadas frequências a secção eficaz de *bremsstrahlung* electrão–electrão tende mais rapidamente para zero devido à repulsão Coulombiana entre os electrões e o aumento da probabilidade de emissão de *bremsstrahlung* de baixa energia durante o recuo do electrão atómico.

A secção eficaz diferencial, $\frac{d\sigma}{dk}$, varia com o inverso do momento do fotão emitido, $\frac{1}{k}$, pelo que a probabilidade de emissão de fotões de baixas energias é favorecida. Ao contrário da dispersão electrão–electrão de Møller, em que a energia máxima do raio–δ corresponde a metade da energia do electrão incidente, existe a probabilidade de numa única dispersão radiativa o fotão de *bremsstrahlung* ser emitido com uma energia igual ao total da energia cinética transportada pelo electrão incidente, k_{max}. Na figura 1.1 encontram-se representadas as secções eficazes diferenciais experimentais no momento do fotão, $\frac{d\sigma}{dk}$, para electrões incidentes de 17 MeV em berílio ($Z = 4$) e chumbo ($Z = 82$), extraídas da biblioteca de secções eficazes EEDL (*Evaluated Electron Data Library*) [Cullen et al., 1991].

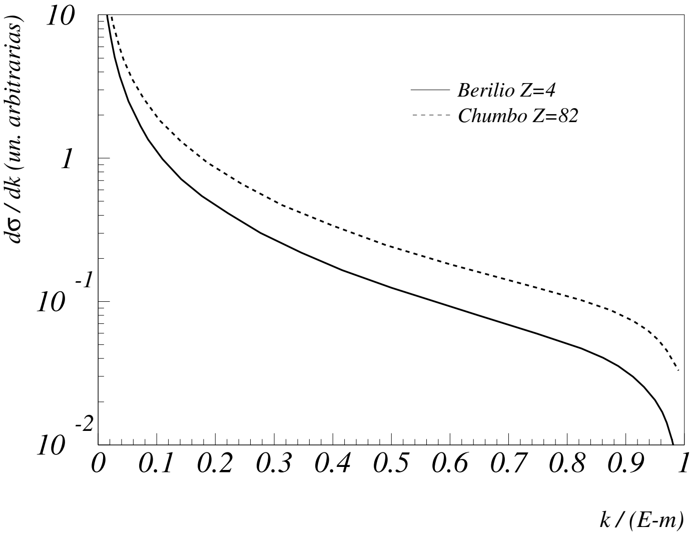


Figura 1.1: Secções eficazes diferenciais experimentais (EEDL) no momento k do fotão, para electrões com energia incidente de 17 MeV em alvos de berílio e chumbo

A secção eficaz total de perdas de energia por *bremsstrahlung*, Φ_{rad}, é calculada por integração da secção eficaz diferencial no momento do fotão multiplicada pelo momento k, na gama de energias do fotão emitido [Jackson, 1975a]:

$$\Phi_{rad} = \frac{1}{E_0} \int_0^{k_{max}} k \frac{d\sigma}{dk}(E_0, k) dk \tag{1.4}$$

Em tecidos biológicos e materiais equivalentes, na gama de energias de interesse para a utilização de feixes de electrões em Radioterapia, Φ_{rad} é inferior à secção eficaz de ionização ou de Møller para colisões electrão–electrão – Figura 1.2[1]. A secção eficaz diferencial no momento e ângulos de emissão dos fotões de *bremsstrahlung* produzidos por electrões com energia E_0 da ordem do MeV é correctamente descrita pela distribuição 2BS de Koch e Motz [Koch and Motz, 1959]. Esta é obtida por integração da secção eficaz diferencial sobre a direcção do electrão disperso. O ângulo polar médio de emissão de fotões de *bremsstrahlung* relativamente à direcção de incidência do electrão, $\bar{\theta}$, é dado por:

$$\bar{\theta} = \frac{m_e c^2}{E_0} \tag{1.5}$$

[1] 1 barn = 10^{-24}cm^2

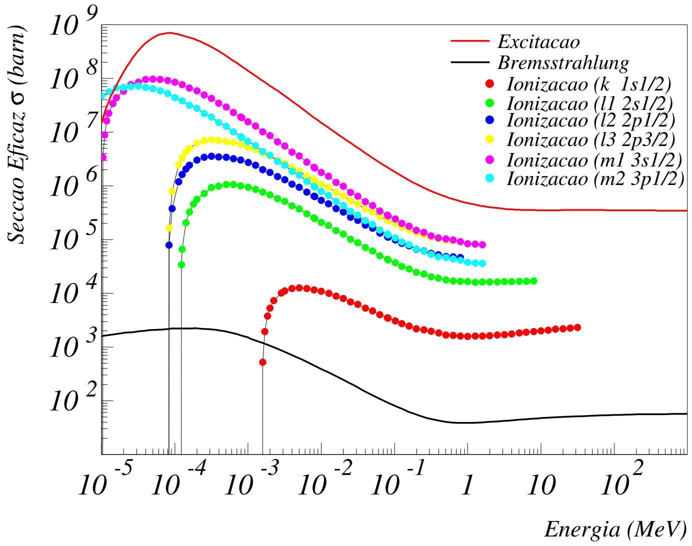


Figura 1.2: Secções eficazes em função da energia do electrão incidente para os processos de ionização nas diferentes camadas orbitais, excitação atómica e produção de *bremsstrahlung*, em alumínio

Os fotões de *bremsstrahlung* produzidos durante a evolução da cascata electromagnética, gerada pelo electrão incidente, interagem por sua vez com o meio. Os principais mecanismos de interacção são: efeito de Compton, produção de pares e efeito fotoeléctrico. Respectivamente:

$$\begin{aligned} \gamma\ e^- &\rightarrow \gamma\ e^- \\ \gamma\ N &\rightarrow e^+\ e^-\ N \\ \gamma\ Atomo &\rightarrow e^-\ Atomo\ ^* \end{aligned}$$

Os positrões, partículas carregadas de massa idêntica à do electrão e que podem ter origem no processo de produção de pares, perdem energia por colisões inelásticas de excitação e ionização (dispersão de Bhabha) e emissão de fotões de *bremsstrahlung*. Os positrões podem ainda aniquilar-se com os electrões do meio dando origem a dois fotões.

$$e^+\ e^- \rightarrow \gamma\ \gamma$$

As partículas carregadas devido a processos de interacção inelásticos ao longo da sua trajectória, perdem a sua energia de um modo *quase contínuo*. Num determinado material, a taxa média de perda de energia por unidade de percurso devido a processos de ionização e excitação ou *collision stopping power*, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col}$, é dada pela equação de Bethe–Bloch [Leo, 1986]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col} = 2\pi n_e r_e^2 m_e c^2 \frac{1}{\beta^2}\left[ln\frac{\tau^2(\tau+2)}{2(I/m_e c^2)^2} + F(\tau) - \delta - 2\frac{C}{Z}\right] \tag{1.6}$$

onde, δ e C são funções de correcção de densidade e de energia de ligação das camadas orbitais respectivamente, τ é a energia cinética do electrão em unidades de $m_e c^2$, I é a energia média de excitação no material com densidade electrónica $n_e = \frac{Z}{A}N_a\rho$, em que N_a e ρ são a constante de Avogadro e a densidade mássica respectivamente. Esta equação apresenta uma variação logarítmica com a energia cinética da partícula incidente para energias superiores ao valor mínimo de ionização.

A perda de energia por processos radiativos de produção de *bremsstrahlung* ou *radiative stopping power* depende linearmente da energia cinética inicial do electrão ou positrão [ICRU, 1984] – Figura 1.3 – sendo contabilizada por um termo adicional, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{rad}$, derivado da secção eficaz total de *bremsstrahlung*, Φ_{rad}:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{rad} = \frac{\rho}{A}N_a E_0 \Phi_{rad} \tag{1.7}$$

A importância relativa de cada contribuição para a perda total de energia depende essencialmente da energia inicial do electrão incidente e do número atómico do material, igualando-se para o valor de *energia crítica.* A *energia critica* para tecidos biológicos ou água é de aproximadamente 90 MeV, o que indica que na gama de energias de feixes clínicos os principais mecanismos de perda de energia são os processos de colisão. Em água, para energias de feixe compreendidas entre 4 MeV e 20 MeV as perdas radiativas representam somente 1.7% a 8.0% da perda total de energia [ICRU, 1984]. Flutuações nos valores de perda de energia devidas à produção de raios–δ com energia suficiente para abandonar a vizinhança imediata da partícula primária, conduzem a que para pequenos volumes o valor de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{total}$ não iguale a energia absorvida localmente. De modo a associar a perda de energia com a energia depositada num determinado volume, consideram-se apenas valores de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col}$ que excluam transferências de energia com produção de partículas secundárias acima de um valor de corte Δ. Esta quantidade é denominada *stopping power* restrito, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta}$ [Groom and *et al*, 2000], sendo o valor de corte escolhido em função das dimensões do volume considerado.

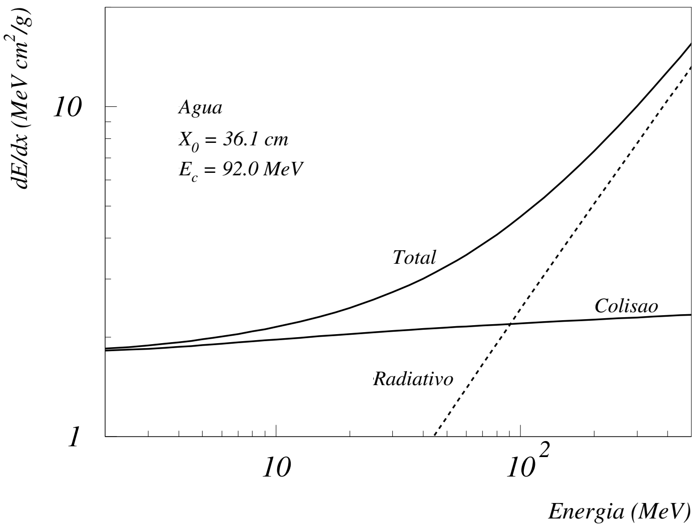


Figura 1.3: Taxa de perdas de energias por colisão e radiativas de electrões em água entre 1 MeV e 50 MeV

1.1.2 Dispersões Elásticas

Além dos processos inelásticos descritos, os electrões e positrões interagem com uma elevada frequência com os átomos através de colisões elásticas de Coulomb. Embora não estejam associadas a perdas de energia, estas colisões desempenham um papel importante na trajectória percorrida pelas partículas carregadas num determinado meio através da alteração à direcção inicial de incidência. Ignorando efeitos de *spin* e de blindagem, as colisões elásticas são governadas pela secção eficaz diferencial em ângulo de Rutherford:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2 Z^2 e^2}{4} \frac{m_e c/\beta p}{sin^4(\theta/2)} \tag{1.8}$$

em que p é o momento da partícula incidente e θ o ângulo polar de deflexão. Devido à dependência com $1/sin^4(\theta/2)$, a secção eficaz para deflexões de pequenos ângulos é elevada, apresentando um comportamento divergente no limite $\theta \to 0$. Deste modo, ao longo da trajectória de um electrão num meio material ocorrem inúmeras colisões de pequenos ângulos que se traduzem em deflexões angulares, correspondentes ao efeito cumulativo de várias dispersões e, com uma menor frequência, colisões elásticas originando deflexões de elevado ângulo. Nestas circunstâncias, é possível considerar dois regimes distintos de caracterização da distribuição angular para o processo de dispersão elástica: *singular*, para espessuras finas de material absorvedor no qual a probabilidade de ocorrência de mais de uma dispersão de Coulomb seja pequena e consequentemente a distribuição angular é dada pela fórmula de Rutherford para grandes ângulos e *múltiplo*, em que o número médio de colisões independentes, N, é superior a 20, recorrendo-se a teorias estatísticas para obter distribuições de probabilidade do ângulo cumulativo de pequenas deflexões angulares em função da espessura de material atravessado. Neste regime, as dispersões são consideradas independentes entre si obedecendo ainda à fórmula de Rutherford, pelo que, é aplicável o teorema do limite central [Jackson, 1975b] sendo a distribuição angular cumulativa aproximadamente gaussiana. O regime intermédio ($1 < N \leq 20$) é designado por *plural* e corresponde a uma região de transição entre dispersões de pequenos e elevados ângulos. Este, não pode ser descrito pela fórmula de Rutherford nem por teorias estatísticas, sendo a sua contabilização efectuada geralmente através de correcções adicionais às distribuições de dispersão no regime *múltiplo* [Leo, 1986]. As teorias estatísticas existentes para a descrição do regime *múltiplo* apresentam diferentes níveis de sofisticação e limites de validade, nomeadamente as teorias de Molière, Goudsmit–Saunderson e de Fermi–Eyges [Bielajew, 2000]. A teoria de Fermi–Eyges é estritamente gaussiana descrevendo somente dispersões elásticas de baixo ângulo ($\theta < 10°$). A distribuição angular, caracterizada por um desvio padrão, σ, dependente do material, é obtida para a aproximação de baixos ângulos ($d\Omega \approx 2\pi\theta d\theta$):

$$f(\theta)\theta d\theta \approx \frac{\theta}{\sigma^2}\ exp\ \left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right) d\theta \tag{1.9}$$

As teorias de Goudsmit–Saunderson e Molière conduzem a distribuições gaussianas na região central de pequenos ângulos incorporando, no entanto, termos correctivos para a descrição de dispersões singulares de elevados ângulos, convergindo assimptoticamente para a distribuição de Rutherford – Figura 1.4. Estas teorias de dispersão múltipla foram desenvolvidas com base na secção eficaz de Rutherford corrigida para o efeito de blindagem. Nesta formulação, a divergência da secção eficaz (1.8) no limite de muito baixos ângulos é eliminada efectuando-se a substituição do potencial, $1/r$, pelo potencial do modelo atómico de Thomas–Fermi:

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} exp\left(-r/R\right) \tag{1.10}$$

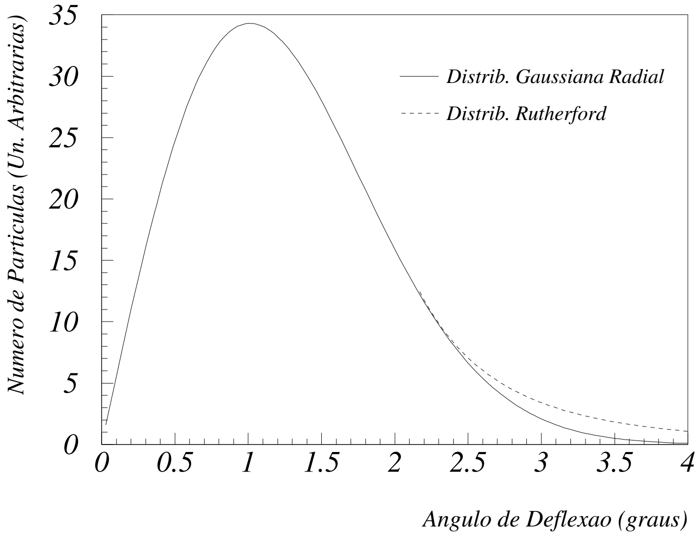


Figura 1.4: Representação das distribuições gaussiana radial e de Rutherford para os regimes de dispersão elástica, múltipla e singular

onde R é o raio atómico, obtendo-se a secção eficaz corrigida:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2Ze^2 m_e \left(\frac{1-\beta^2 \sin^2(\theta/2)}{1-\beta^2} \right) \frac{1}{[(1/R)^2 + 2k^2(1-\cos\theta)]^2} \tag{1.11}$$

A distribuição angular segundo a teoria de Molière, válida para ângulos inferiores a 30°, é deduzida com base na aproximação de pequenos ângulos à secção eficaz (1.11) sendo descrita como uma série dada por [Li and Rogers, 1995]:

$$f(\theta)\theta d\theta = \vartheta[2e^{-\vartheta^2} + B^{-1} f^{(1)}(\vartheta) + B^{-2} f^{(2)}(\vartheta) + \ldots] d\vartheta \tag{1.12}$$

com,

$$f^{(n)}(\vartheta) = \frac{1}{n!} \int_0^\infty u du J_0(\vartheta u) e^{-u^2/4} \left(\frac{u^2}{4} ln \frac{u^2}{4} \right)^n \tag{1.13}$$

onde ϑ é o ângulo de dispersão reduzido, J_0 é a função de Bessel de ordem zero e o parâmetro B é definido pela equação $B - lnB = lnN$, em que N é o número de colisões elásticas. O primeiro termo é gaussiano dominante para a região de dispersões de pequenos ângulos, sendo comparável à distribuição de Fermi–Eyges considerando $\vartheta = \theta/\sqrt{2}\sigma$. Os termos de ordem superior, $f^{(1)}$ e $f^{(2)}$, incluem correcções adicionais garantindo que para ângulos elevados a função converge aproximadamente para a distribuição de Rutherford. Bethe demonstrou que esta formulação é equivalente à desenvolvida na teoria de Goudsmit–Saunderson, válida para qualquer ângulo de dispersão sem recurso a aproximações de pequenos ângulos, através da introdução de um factor de correcção simples, $\sqrt{\theta/\sin\theta}$, à distribuição de Moliére [Bethe, 1953].

1.2 Caracterização Dosimétrica

Em Radioterapia, a distribuição de dose absorvida num meio absorvedor produzida por um feixe de electrões para uma determinada configuração (energia e campo de radiação), pode ser caracterizada pela curva de dose ao longo do eixo central de radiação e por perfis transversais medidos a diferentes profundidades de penetração do feixe. Na práctica clínica, esta informação é geralmente obtida para todas as configurações de feixe disponíveis em cada acelerador linear, por medições experimentais em condições de irradiação padrão [Jenkins et al., 1989] com câmaras de ionização em *fantomas* homogéneos de água – *dosimetria básica.*

A grandeza, *dose absorvida* num meio material, quantifica a energia depositada, dE, num volume de massa dm. A unidade SI desta grandeza é o Gray, que corresponde a 1 Joule/1 kg :

$$D = \frac{dE}{dm} \tag{1.14}$$

Os valores de dose absoluta são frequentemente normalizados a um valor de referência, D_{norm}, escolhido como a dose máxima segundo o eixo central de radiação. Nestas condições define-se *dose relativa percentual* como:

$$D_{rel} = \frac{D}{D_{norm}} \cdot 100\% \tag{1.15}$$

Curvas de dose relativas percentuais em profundidade típicas de feixes de electrões clínicos de energias nominais 6, 10 e 15 MeV obtidas experimentalmente num *fantoma* homogéneo de água de 50×50×50 cm^3 são mostradas na figura 1.5. A região compreendida entre a superfície do *fantoma* e a profundidade para a qual se observa o valor máximo de dose, R_{100}, designada por *build–up*, é caracterizada por um aumento da dose absorvida no meio. Tal deve-se a eventos de interacção por dispersão múltipla com as camadas superficiais de material, provocando o aumento da deflexão ângular média da trajectória dos electrões. A obliquidade do percurso

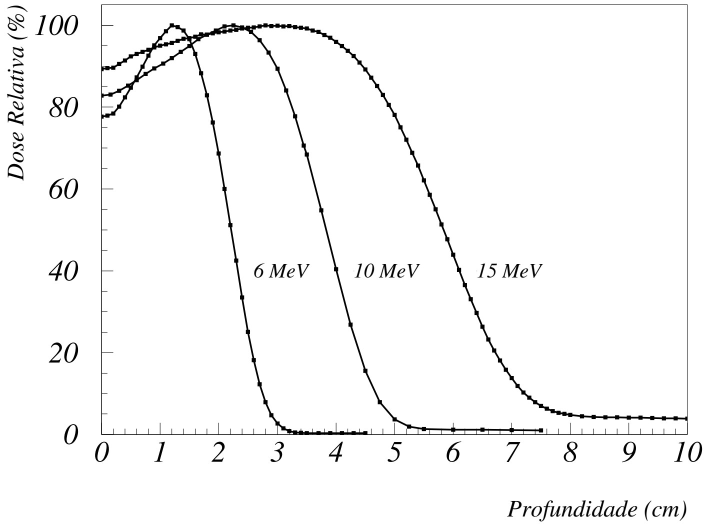


Figura 1.5: Curvas de dose em profundidade para feixes de electrões de energias nominais 6, 10 e 15 MeV

dos electrões dispersos origina uma maior densidade de ionização por unidade de comprimento, conduzindo ao aumento da energia depositada. A região de *build–up* é mais pronunciada para curvas de dose em profundidade de feixes de electrões com menor energia, devido à maior probabilidade de dispersão para ângulos mais elevados. A R_{100}, o feixe inicial de electrões atinge o máximo da dispersão e perda de energia por unidade de comprimento. A variação máxima de dose admissível no volume alvo para tratamentos com feixes de electrões é de $\pm 5\%$, pelo que a área útil de tratamento de um feixe terapêutico de electrões inclui somente a região de *build–up* e nível de dose de 90–80% após o valor máximo de dose, D_{max}, localizada a R_{100}. A partir desta profundidade verifica-se uma diminuição acentuada da dose, caracterizada por um gradiente que depende da energia de feixe [Klevenhagen, 1985]. Devido à interacção do feixe de electrões com as diferentes estruturas do acelerador linear, verifica-se a presença de uma componente de fotões contaminantes que, associada à produção de *bremsstrahlung* no meio irradiado, origina o aparecimento de uma região de dose residual visível após a profundidade R_p – Figura 1.6. A dose depositada na região de *bremsstrahlung* aumenta linearmente com a energia do feixe de electrões, tornando-se clinicamente não desprezável para energias superiores a 10 MeV. O parâmetro R_p define o alcance efectivo ou *practical range* do feixe, determinado pela intersecção da tangente à curva de dose na região linear de decréscimo (em torno do ponto de 50% de dose) com a linha de extrapolação da região de *bremsstrahlung* até à superfície do *fantoma* – Figura 1.6.

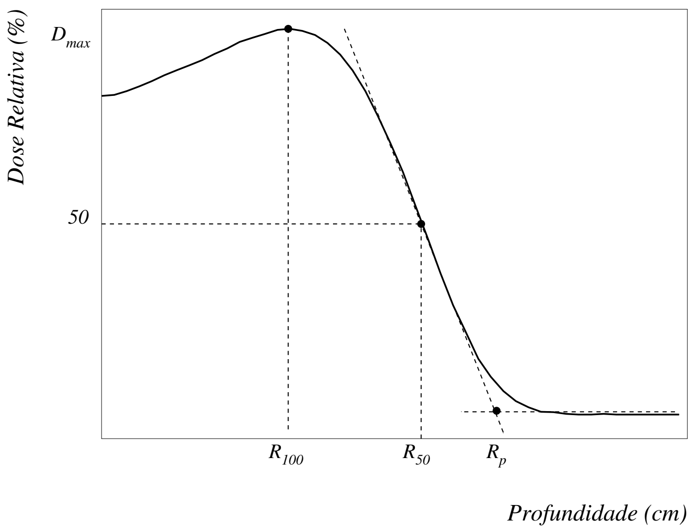


Figura 1.6: Parâmetros dosimétricos de uma curva de dose um profundidade

Os parâmetros dosimétricos, R_{100} e R_p, extraídos das curvas de dose em profundidade são função da energia inicial do feixe à superfície do *fantoma*, do número atómico do material que constitui o *fantoma* e de outros factores como a dimensão e geometria do campo de radiação e a distância relativa do *fantoma* ao acelerador linear.

A secção transversal da distribuição de dose produzida pelo feixe de electrões e a sua uniformidade é avaliada em perfis de dose medidos perpendicularmente ao eixo de radiação a profundidades fixas – Figura 1.7. Os perfis transversais são normalizados ao valor de dose encontrado segundo o eixo central para a respectiva profundidade. Para distâncias ao eixo central inferiores às dimensões do campo de radiação os perfis apresentam uma região de dose aproximadamente constante. Com o aumento da distância ao eixo central a dose decai de forma acentuada, originando uma região designada por *penumbra*. A largura da penumbra é definida como a diferença entre as distâncias ao eixo central dos níveis de dose 90–10% ou 80–20% em cada perfil normalizado. Devido a processos de dispersão elástica e

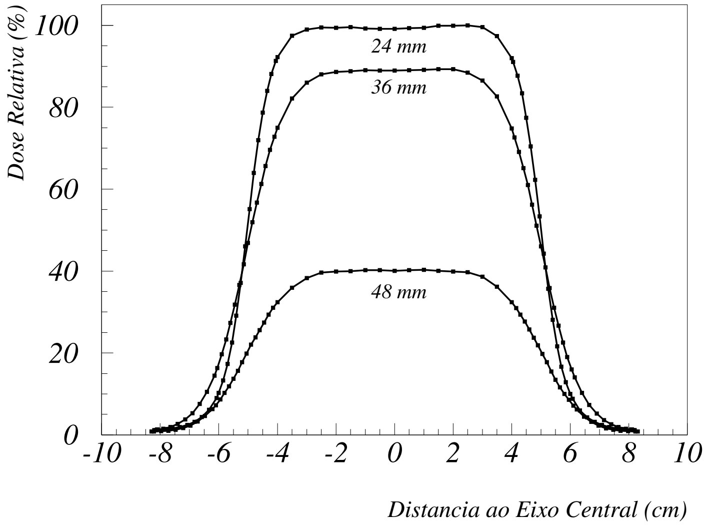


Figura 1.7: Perfis transversais de dose de um feixe de electrões de energia nominal 12 MeV às profundidades 24, 36 e 42 mm para um campo de radiação 10×10 cm^2

inelástica, que contribuem para o aumento da divergência do feixe ao longo da sua penetração no meio, a região de penumbra aumenta em profundidade.

A selecção das melhores condições de irradiação em função de cada tratamento em Radioterapia com feixes de electrões, tem como principal objectivo garantir uma distribuição de dose máxima e uniforme no tumor ou volume alvo, sem colocar em risco a integridade dos tecidos saudáveis localizados nas proximidades da região irradiada. Este processo é efectuado durante a chamada fase de *planeamento do tratamento* [Williams and Thwaites, 2000]. Nesta fase, após a localização e definição do volume alvo, recorre-se a sistemas de cálculo de dose também designados por sistemas de planeamento, que permitem testar e avaliar de forma rápida e interactiva diferentes abordagens terapêuticas para obtenção da distribuição de dose prescrita para o tratamento. Os sistemas de planeamento convencionais para tratamentos com feixes de electrões recorrem a algoritmos aproximados, necessitando de informação experimental característica das distribuições de dose em *fantomas* homogéneos de água. Estas medições dosimétricas não reproduzem a interacção do feixe de electrões com geometrias anatómicas realistas compreendendo diferentes tecidos biológicos ou heterogeneidades. Para a contabilização da informação anatómica específica do doente, são adquiridos conjuntos de imagens de tomografia axial computadorizada (TAC) posteriormente fornecidos aos sistemas de planeamento. Estes, através de algoritmos de correcção, modificam as distribuições de dose de referência para contabilização de efeitos de dispersão e atenuação nos diferentes tecidos e diferentes condições de irradiação, como a obliquidade do ângulo de incidência do feixe relativamente à superfície irradiada. Na sua maioria os sistemas de planeamento fornecem resultados a menos de 0.5-1.0% de medidas experimentais em geometrias de referência apresentando, no entanto, limitações que comprometem a taxa de sucesso de tratamento das quais se destaca o cálculo de dose em regiões adjacentes a heterogeneidades, onde se podem verificar desvios de 10–30%. Recentemente, a utilização do método de Monte Carlo para aplicações em Radioterapia proporcionou o aumento da precisão de cálculo de dose [Andreo, 1991, Bielajew, 1994], permitindo avaliar as aproximações cometidas pelos sistemas de planeamento convencionais [Ding et al., 1999].

Referências

[Andreo, 1991] Andreo, P. (1991). Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Phys. Med. Biol.*, 36(7):861–920. Topical Review.

[Bethe, 1953] Bethe, H. A. (1953). Molière theory of multiple scattering. *Phys. Rev.*, 89(6):1256–66.

[Bielajew, 1994] Bielajew, A. F. (1994). Monte Carlo modeling in external electron beam radiotherapy – Why leave it to change? In *Proc. 11th Int. Conf. on the Use of Computers in Radiation Therapy.* http://www.irs.inms.nrc.ca/inms/irs/papers.

[Bielajew, 2000] Bielajew, A. F. (2000). *Fundamentals of the Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport*, chapter 13, Electron Monte Carlo simulation, pages 179–202. The University of Michigan.

[Cullen et al., 1991] Cullen, D. E., Perkins, S. T., and Seltzer, S. M. (1991). Tables and Graphs of Electron Interaction Cross Section 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z=1–100. Technical Report UCRL–50400, Vol 31, Lawrence Livermore National Laboratory.

[Ding et al., 1999] Ding, G. X., Cygler, J. E., Zhang, G. G., and Yu, M. K. (1999). Evaluation of a commercial three–dimensional electron beam treatment planning system. *Med. Phys.*, 26(12):2571–80.

[Fernow, 1986] Fernow, R. C. (1986). *Introduction to Experimental Particle Physics*, chapter 2, Electromagnetic interactions, pages 29–78. Cambridge University Press.

[Groom and *et al*, 2000] Groom, D. E. and *et al* (2000). Review of Particle Physics. *The European Physical Journal*, C15:1+.

[ICRU, 1984] ICRU (1984). *Stopping Powers for Electrons and Positrons*. ICRU – International Comimission On Radiation Units and Measurements. Report 37.

[Jackson, 1975a] Jackson, J. D. (1975a). *Classical Electrodynamics*, chapter 14, Radiation by moving charges, pages 654–94. John Wiley and Sons.

[Jackson, 1975b] Jackson, J. D. (1975b). *Classical Electrodynamics*, chapter 13, Collisions between charged particles, energy loss, and scattering, pages 618–51. John Wiley and Sons.

[Jenkins et al., 1989] Jenkins, T. M., Nelson, W. R., Rindi, A., Nahum, A. E., and Rogers, D. W. O., editors (1989). *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, chapter 26, Dose calculations for radiation treatment planning, pages 549–71. Plenum Press, New York.

[Khan, 1984] Khan, F. M. (1984). *The Physics of Radiation Therapy*, chapter 14, Electron beam therapy, pages 299–353. Williams and Wilkins.

[Klevenhagen, 1985] Klevenhagen, S. C. (1985). *Physics of Electron Beam Therapy*, chapter 3, Basic parameters of electron beams, pages 67–88. Adam Hilher Ltd.

[Koch and Motz, 1959] Koch, H. W. and Motz, J. (1959). Bremsstrahlung cross-section formulas and related data. *Rev. Mod. Phys.*, 31:902–55.

[Leo, 1986] Leo, W. R. (1986). *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, chapter 2, pages 34–50. Springer–Verlag.

[Li and Rogers, 1995] Li, X. A. and Rogers, D. W. O. (1995). Electron mass scattering powers: Monte Carlo and analytical calculations. *Med. Phys.*, 22:791–8.

[Salvat, 2000] Salvat, F. (2000). Electron elastic and inelastic interactions. Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications – Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23–26 October 2000, Tutorial Note EG–1.

[Seltzer and Berger, 1985] Seltzer, S. M. and Berger, M. J. (1985). Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons. *Nucl. Instrum. Methods B*, 12:95–134.

[Williams and Thwaites, 2000] Williams, J. R. and Thwaites, D. I., editors (2000). *Radiotherapy Physics*, chapter 8, Treatment planning for external beam therapy: principles and basic techniques, pages 150–79. Oxford University Press, second edition.

Capítulo 2

Códigos de Simulação de Monte Carlo

O método de Monte Carlo foi originalmente proposto por Stan Ulam e John von Neumann, durante a II Guerra Mundial no âmbito do projecto Manhattan para o desenvolvimento de armas nucleares, considerados pioneiros na implementação de algoritmos de cálculo de Monte Carlo em calculadoras e computadores digitais. As primeiras aplicações do método ao estudo de produção de cascatas electromagnéticas em Física de Altas Energias foram idealizadas por Wilson em 1952, estabelecendo a base para o desenvolvimento dos códigos de simulação de Monte Carlo para transporte de radiação em meados dos anos 60 [Wilson, 1952]. Desde então, este método tem sido aplicado em inúmeras áreas de estudo promovendo o aparecimento dos chamados *estudos de simulação* surgindo, em determinados casos, como uma alternativa às abordagens experimentais. Nos últimos anos, tem-se verificado um maior interesse pela aplicação do método de Monte Carlo à Medicina e Física Médica [Andreo, 1991], destacando-se a simulação de detectores em Medicina Nuclear, previsão de distribuições de dose absorvida em Radioterapia e interacção de partículas ionizantes com estruturas como a molécula do DNA em micro e nanodosimetria.

O método de Monte Carlo é um esquema numérico estatístico ou estocástico que, no contexto do transporte de radiação, simula trajectórias individuais de partículas numa geometria arbitrária, recorrendo a sequências de números aleatórios para o processo de amostragem das distribuições de probabilidade que governam os processos físicos envolvidos na interacção da radiação com a matéria. Este método permite calcular valores médios de quantidades macroscópicas como a energia depositada ou fluência de partículas, por simulação de um elevado número de trajectórias microscópicas ou *histórias* de Monte Carlo. A incerteza estatística das diferentes grandezas depende do número de histórias simuladas, N, e decresce com $N^{-1/2}$, o que consoante a precisão pretendida, complexidade e dimensões da geometria pode tornar o tempo de cálculo demasiado longo.

Tradicionalmente, os códigos de Monte Carlo utilizados em aplicações médicas têm a sua origem na Física de Altas Energias, para simulação da resposta de detectores à interacção de partículas de elevadas energias produzidas em aceleradores e na Física Nuclear na simulação do funcionamento de reactores nucleares. Os esquemas de transporte destes códigos foram mais tarde extendidos para a gama de energias terapêuticas e de diagnóstico ($<$ 250 MeV). Estes são caracterizados por um intervalo de validade de energias alargado, apresentando uma descrição rigorosa da modelação dos processos físicos e contendo geralmente ferramentas robustas de codificação de geometrias – *sistemas generalistas* [Kling et al., 2001]. Como exemplo de sistemas generalistas surgem os códigos MCNP (*Monte Carlo N–Paticles Transport*)[1] de transporte acoplado neutrão–fotão–electrão, EGS (*Electron Gamma Shower*) [2] para simulação do transporte fotão–electrão, GEANT (*GEometry ANd Tracking*)[3] e FLUKA (*FLUctuating KAskades*) [3], ambos com capacidade de transporte hadrão–fotão–leptão. Actualmente, têm sido desenvolvidos códigos de simulação de Monte Carlo para aplicações específicas – *sistemas dedicados* [Kling et al., 2001]. Estes sistemas, cujos resultados são válidos numa gama de energias mais restricta, incorporam esquemas de transporte optimizados e aproximações aos processo físicos menos relevantes aumentando desta forma a eficiência do processo de simulação e reduzindo o tempo de cálculo necessário. Os códigos VMC^{++} (*Voxel Monte Carlo*)[4] e DPM (*Dose Planning Method*)[5] foram recentemente desenvolvidos e validados para aplicações médicas de cálculo de distribuições de dose em Radioterapia.

[1]LANL – *Los Alamos National Laboratory*, EUA

[2]SLAC – *Stanford Linear Accelerator Center*, EUA

[3]CERN – *European Organization for Nuclear Research*, Suiça

[4]NRC – *National Research Council*, Canadá

[5]*University of Michigan*, EUA

Neste capítulo, são apresentadas algumas noções sobre o mecanismo de simulação de transporte de radiação por Monte Carlo e efectuada uma descrição sumária dos códigos de transporte generalistas EGS (versão 4.3.2) e GEANT (versão 3.21) e do sistema dedicado DPM (versão 1.1) utilizados no decurso deste trabalho.

2.1 Simulação do Transporte de Radiação

Embora os processos físicos da interacção dos electrões e fotões com a matéria estejam bem estabelecidos, de uma forma geral é impossivel desenvolver uma expressão analítica para a descrição do transporte das partículas num meio material. Tal deve-se essencialmente à complexa modelação de processo de interacção envolvendo produção de partículas secundárias como raios–δ ou fotões de *bremsstrahlung* e processos de dispersão. A utilização do método de Monte Carlo permite a resolução de questões relacionadas com o transporte de radiação considerando, de forma precisa, os diferentes mecanismos de interacção contabilizando os efeitos da produção de partículas secundárias. Este método considera ainda os constrangimentos da geometria na qual o transporte se realiza, modificando as secções eficazes dos diferentes processos físicos em função dos materiais constituintes.

O processo de transporte é baseado no conhecimento do livre percurso médio que permite caracterizar a distribuição de densidade de probabilidade da distância percorrida, t, pela partícula entre duas interacções consecutivas, $Prob \approx \exp(-t/\lambda)$, sendo:

$$\lambda = \frac{A}{N_a \ \rho \ \sigma_{total}} \tag{2.1}$$

em que A, N_a e ρ são respectivamente o número de massa, o número de Avogadro e a densidade do material, e σ_{total} a secção eficaz total, proporcional à probabilidade de interacção. A distância é, deste modo, determinada por $t = -\lambda \ln(\xi)$, em que ξ é um número pseudo–aleatório amostrado entre]0,1]. O tipo de interacção é selecionado a partir da amostragem das probabilidades relativas de cada processo, i, calculadas pela razão σ_i/σ_{total}. No caso de produção partículas secundárias no local ou vértice de interacção por processos inelásticos, as características cinemáticas destas são obtidas por amostragem das respectivas secções eficazes diferenciais em energia e ângulo e o seu transporte efectuado de forma individual. A energia e direcção da partícula primária são posteriormente ajustadas, sendo amostrada uma nova distância até ao próximo vértice. Este procedimento é repetido até que a partícula seja absorvida no meio ou a sua energia seja inferior a um valor de corte de transporte mínimo pré–estabelecido. A metodologia descrita, também designada por Monte Carlo *análogo*, é adequada para o transporte de fotões ou outras partículas que possuem uma baixa secção eficaz e um correspondente elevado percurso médio. No entanto, a simulação do transporte de partículas carregadas por Monte Carlo *análogo* é incomportável na maioria das aplicações devido ao elevado tempo de processamento necessário para obtenção de uma incerteza estatística aceitável nas grandezas calculadas, dado que em média, para um electrão relativista, ocorrem cerca de 10^4–10^5 colisões elásticas e 10^5–10^6 interacções inelásticas. Tal motivou o desenvolvimento de uma lógica de esquemas de transporte mais elaborada [Salvat et al., 1999].

Em 1963, Berger estabeleceu o denominado método de *história condensada*, que é actualmente o elemento fundamental dos algoritmos de simulação do transporte de electrões por Monte Carlo. Neste método, o electrão é transportado num material ao longo de segmentos designados por *passos* de história condensada ou de dispersão múltipla, substituindo-se a maioria das interacções elásticas e inelásticas por uma única interacção *virtual* – Figura 2.1.

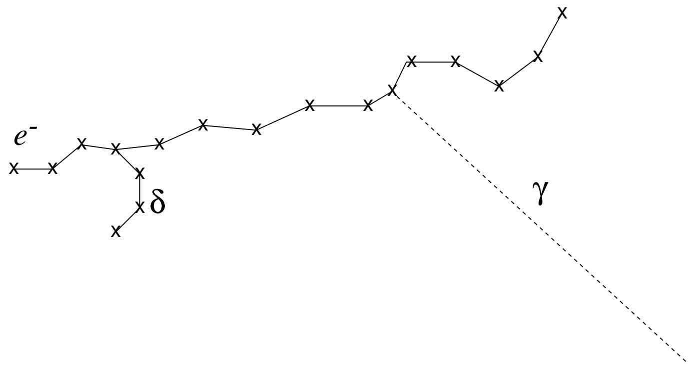


Figura 2.1: Simulação do transporte de um electrão por Monte Carlo por sucessivos passos de *história condensada* entre vértices de interacção discretos, com produção de um raio–δ e um fotão de *bremsstrahlung*

Esta inclui o efeito cumulativo do agrupamento estatístico de diferentes mecanismos de interacção dos electrões com a matéria, descrevendo as deflexões angulares devido a dispersões elásticas e perdas de energias associadas a processos inelásticos. Os processos agrupados correspondem a interacções que envolvem pequenas transferências de energia e dispersões de baixos ângulos designadas por *soft interactions*, nas quais se incluem as dispersões de Møller de baixa energia, excitação atómica, produção de fotões de *bremsstrahlung* com baixo momento e dispersão elástica de Coulomb. A dispersão de Møller e produção de *bremsstrahlung* de elevada energia, envolvendo produção de partículas secundárias, são considerados eventos *catastróficos* – *hard interactions* – sendo modelados de forma discreta ou *análoga*. Esta abordagem, representa uma vantagem considerável relativamente à modelação detalhada de todas as interacções dos electrões, permitindo atingir um ganho de eficiência, em relação à simulação *análoga*, de três ou quatro ordens de grandeza [Bielajew, 2000].

De acordo com as diferentes metodologias adoptadas pelos algoritmos de Monte Carlo para a simulação de eventos catastróficos, Berger dividiu os esquemas de história condensada em duas classes distintas:

- **Classe I** – Os efeitos, na partícula primária, de *todas* as interacções (*soft* e *hard*) em cada *passo* são contabilizadas de forma cumulativa
- **Classe II** – Os efeitos, na partícula primária, devido a eventos catastróficos, são contabilizadas no vértice de interacção por geração explícita de partículas secundárias

Nos esquemas de transporte de classe I, devido ao agrupamento das interacções catastróficas no passo de história condensada, a distribuição para a amostragem das perdas de energia da partícula primária inclui valores de perda de energia devido à produção de electrões secundários [Jenkins et al., 1989a]. Estas distribuições de probabilidade recorrem a valores de perdas de energia totais por colisão, incorporando flutuações estatísticas descritas pelas teorias de Landau, Vavilov e gaussiana [Leo, 1986]. No final de cada passo de dimensão, s, a energia da partícula primária é dada por:

$$E_{final} = E_{inicial} - \Delta E(s) \tag{2.2}$$

em que $\Delta E(s)$ é o valor da perda de energia ao longo do passo, no qual se encontra previamente incluido o efeito da produção de electrões secundários. Deste modo, a simulação de um raio–δ, não altera a energia da partícula primária, pelo que o estado final desta não se encontrado directamente correlacionado com a partícula produzida, que pode ser emitida em qualquer ponto ao longo do passo.

Nos algoritmos de Monte Carlo de classe II, o processo de produção de electrões e fotões secundários acima do valor limiar de energia, Δ, é simulado explicitamente, isto é, de forma *análoga*. O estado final da partícula primária é bem definido e encontra-se correlacionado com as variáveis cinemáticas da partícula secundária produzida. Abaixo da energia de produção, as interacções inelásticas e elásticas são agrupadas estatisticamente no passo de história condensada. Ao longo deste, as perdas de energia para raios–δ são obtidas a partir de distribuições de perdas de energia restritas de colisão, sendo a energia final da partícula primária dada por:

$$E_{final} = E_{inicial} - s\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta} - E_{\delta} \tag{2.3}$$

onde $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta}$ é o valor de *stopping power* restrito que corresponde ao valor de energia perdida por unidade de percurso para partículas secundárias com energias inferiores ao limiar de produção, Δ. A contabilização de perdas de energia para fotões de *bremsstrahlung* é efectuada de forma semelhante, utilizando valores de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{rad,\Delta}$ em que a energia da partícula secundária corresponde ao momento do fotão emitido, $E_{\gamma} = k$. A distância entre dois vértices de interacção para electrões é estabelecida de modo semelhante ao método *análogo* mas, em que o livre percurso médio entre eventos catastróficos é obtido a partir da secção eficaz total $\int_{\Delta}^{T_{max}} \frac{d\sigma}{dT} dT$, sendo os limites da integração o limiar da energia de corte Δ e o valor máximo da energia transferida. No entanto, devido às perdas de energia por processos contínuos ao longo dos vários passos, é necessário manter a secção eficaz constante entre duas interacções discretas – pontos t e t_0. Tal é efectuado através da adicção de um artefacto matemático ou secção eficaz total fictícia, σ_{fict} [Salicio, 1985]:

$$\sigma_{total,fict}(t) = \sigma_{total,real}(t) + \sigma_{fict}(t) = constante = \sigma_{total,real}(t_0)$$

Assumindo a distância à próxima interacção como o livre percurso médio determinado com a secção eficaz, $\sigma_{total,fict}(t)$, o vértice de interacção é aceite ou rejeitado por comparação da fracção $\sigma_{total,real}(t)/\sigma_{total,real}(t_0)$ com um número aleatório no intervalo]0,1]. Se o valor da fracção for inferior ao número amostrado, a probabilidade de se ter atingido o vértice de interacção é pequena e nenhum processo é simulado, caso contrário a interacção é considerada real. Este procedimento é válido somente na região em que a secção eficaz total de interacção decresce com a diminuição da energia do electrão, aproximadamente para valores superiores a 50–100 keV.

No final de cada passo, a deflexão angular da partícula devido a múltiplas colisões é determinada com base nas teorias de dispersão múltipla de Goudsmit–Sauderson ou de Molière que, devido aos seus diferentes formalismos, se tornam mais adequadas aos algoritmos de classe I e II respectivamente. A distribuição de Goudsmit–Sauderson permite determinar o ângulo de dispersão de forma exacta, correlacionando-o com as dimensões do passo e perdas totais de energia. Esta distribuição não impôe à partida uma forma específica para a secção eficaz, ao contrário do formalismo de Molière, podendo ser usadas diferentes formulações como por exemplo a secção eficaz de Rutherford corrigida por efeitos de blindagem ou secção de Mott com correcções relativistas e de efeitos de *spin*. A sua amostragem requer um intenso cálculo numérico que não pode ser executado no final de cada passo sem comprometer a eficiência do processo de simulação. Em alternativa, os algoritmos de classe I apresentam distribuições angulares calculadas para valores pré–determinados de perdas de energia e dimensões de passo. Nestas circunstâncias, o transporte dos electrões é efectuado segundo uma grelha de valores de perdas de energia/passo. Os algoritmos de classe II, não apresentam passos pré–determinados, requerendo que o procedimento de amostragem da distribuição angular seja efectuado no final de cada passo *on–the–fly*. Este procedimento favorece a aplicação da teoria de Molière que, embora seja menos exacta e tenha um limite de validade mais restrito o que conduz à utilização de passos de menores dimensões, apresenta um cálculo numérico rápido com esquema de implementação simples [Kawrakow and Bielajew, 1998b].

O conhecimento da distribuição angular após o passo, permite caracterizar univocamente a direcção do electrão, mas não fornece informação sobre a sua distribuição espacial. Tal deve-se à inexistência de uma teoria que relacione de modo exacto a distância percorrida ao longo do passo de história condensada, s, com o desvio lateral da trajectória, ρ – Figura 2.2.

Nestas condições, a posição final encontra-se indeterminada. Em princípio, a deter-

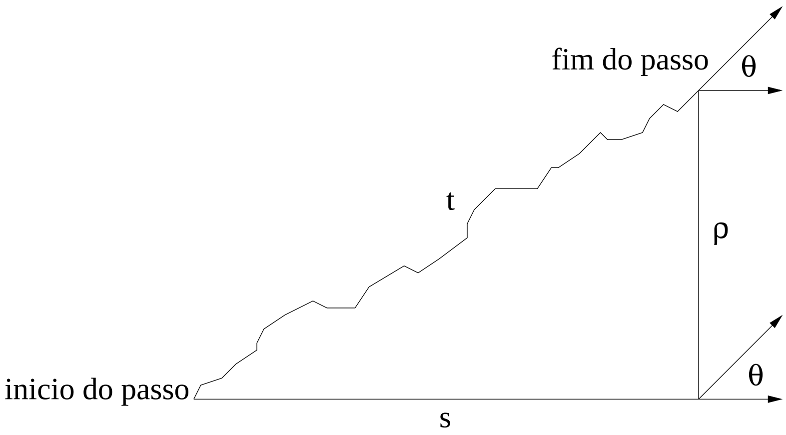


Figura 2.2: Simulação do transporte de um electrão ao longo de um passo de história condensada

minação das distribuições espaciais poderia ser efectuada resolvendo explicitamente a equação de transporte de Boltzman [Bielajew, 2000]:

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} + \vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla} + \sigma_s(E)\right]\psi(\vec{x},\vec{\Omega},s) = \int_{4\pi} d\Omega'\sigma_s(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}',E)\psi(\vec{x},\vec{\Omega}',s) \tag{2.4}$$

em que $\sigma_s(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}',E)$ é a secção eficaz diferencial em ângulo sólido, $\sigma_s(E) = \int_{4\pi} d\Omega'\sigma_s(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}',E)$ a secção eficaz total, $\vec{\Omega}\cdot\vec{\nabla}$ a derivada segundo a direcção $\vec{\Omega}$, $\vec{x}$ a posição e E a energia do electrão. A solução formal desta equação consiste num conjunto de equações diferenciais acopladas, o que impossibilitou até ao momento a sua resolução explícita. Como alternativa, é possível recorrer à teoria de Lewis [Lewis, 1950] que, a partir da equação (2.4), permite derivar de modo exacto *independentemente da formulação da secção eficaz de dispersão elástica*, os momentos ou valores médios de grandezas espaciais ($\langle z\rangle$ e $\langle x^2+y^2\rangle$), angulares ($\langle\cos\theta\rangle$) e as correlações ($\langle z\cos\theta\rangle$, $\langle x\sin\theta\cos\phi\rangle$) no final de um passo de história condensada. Como exemplo, os momentos de Lewis para a profundidade e desvio lateral atingidos no final de um passo são dados, respectivamente por:

$$\langle z\rangle = \int_0^s k_1(s)ds \tag{2.5}$$

$$\langle x^2+y^2\rangle = \frac{4}{3}\int_0^s ds'\exp[-k_1(s')]\int_0^{s'} ds''k_1(s'-s'')[1-k_2(s'')] \tag{2.6}$$

em que k_1 e k_2 são os momentos da secção eficaz elástica diferencial em ângulo polar obtido genericamente por $k_l(s) = 2\pi N\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\sigma(\cos\theta)[1-P_l(\cos\theta)]$ e

P_l os polinómio de Legendre de grau l. Estes resultados podem ser utilizados de modo a guiar o desenvolvimento de um esquema ou *mecânica de transporte*, capaz de colocar o electrão na posição correcta após um passo de dispersão múltipla. A qualidade e capacidade de descrever correctamente a distribuição espacial é posteriormente avaliada através da comparação dos momentos calculados com os momentos exactos de Lewis [Kawrakow and Bielajew, 1998a].

2.2 Sistemas Generalistas

2.2.1 *Electron Gamma Shower* – EGS

O código de simulação de Monte Carlo EGS (*Electron Gamma Shower*) foi desenvolvido em 1978 para aplicações em Física de Altas Energias, em particular para estudos de deposição de energia de electrões e fotões em calorímetros electromagnéticos [Bielajew et al., 1994]. As primeiras versões deste código permitiam simular o transporte de electrões, positrões e fotões para energias na ordem das centena de MeV. Posteriormente, os algoritmos de transporte foram extendidos até à gama de energia de interesse para aplicações médicas [Nelson et al., 1985].

O código de Monte Carlo EGS4 permite efectuar a simulação do transporte de radiação electromagnética em elementos de número atómico compreendido entre 1 a 100 e compostos ou misturas numa gama de energias entre 10 keV e 1 TeV para partículas carregadas, e entre 1 keV e 10 TeV para fotões. O transporte de fotões é realizado de forma *análoga* por simulação dos processos de produção de pares, dispersão de Compton, dispersão elástica de Rayleigh e efeito fotoeléctrico [Jenkins et al., 1989b]. Relativamente ao transporte de partículas carregadas este código apresenta um esquema de classe II. Os mecanismos de interacção *catastróficos* simulados acima do limiar de produção de partículas secundárias são: produção de fotões de *bremsstrahlung*, dispersão de Møller e dispersão Bhabha. No sistema EGS4, as secções eficazes para os diferentes processos físicos de interacção com a matéria e tabelas de perdas restrictas de energia são obtidas com recurso ao programa PEGS4 (*Preprocessor for EGS4*). O cálculo das perdas de energia para partículas secundárias carregadas, abaixo dos valores de corte por processos de colisão, com uma precisão a menos de 1%, é efectuado segundo a fórmula de Bethe–Bloch restricta:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta} = 2\pi n_e r_e^2 m_e c^2 \frac{1}{\beta^2}\left[ln\left(\frac{2m_e c^2(\gamma+1)}{I^2}\right) + F^{\pm}(\gamma-1,\tau_{up}) - \delta - 2\frac{C}{Z}\right] \tag{2.7}$$

onde, $\Delta =$ `AE` é a variável que define o valor limiar de energia para a produção de raios–δ, $\tau_{up} = min(\tau_c, \tau_{max})$, τ_{max} é a energia máxima transferível e $\tau_c =$ `AE`$/m_e c^2$. Factores de correcção à formula de Bethe–Bloch restricta são determinados por ajuste da distribuição de perda de energia total de colisão a valores experimentais tabelados nas bibliotecas ICRU37/ESTAR–NIST [ICRU, 1984]. As perdas de energia radiativas restrictas são obtidas a partir da integração da secção eficaz total de produção de *bremsstrahlung* entre os valores $k = 0$ e o limiar de energia para produção de fotões $k =$`AP`. De forma semelhante, factores de correcção empíricos são derivados através do ajuste da distribuição da perda de energia radiativa total a valores experimentais. Os valores de `AE` e `AP` são fixados pelo utilizador e posteriormente transferidos para o pré–processador PEGS4. As secções eficazes totais de processos inelásticos, para modelação da interacção de partículas carregadas com os diferentes materiais, são contruídas a partir das distribuições de Møller e Bhabha. As secções eficazes totais de fotões são obtidas por parametrizações às secções eficazes totais experimentais, para diferentes materiais em função da energia contidas na biblioteca PHOTX [Trubey et al., 1988]. A dispersão múltipla de Coulomb para partículas carregadas é simulada recorrendo à teoria de Molière. A dimensão mínima do passo, t_{min}, admissível no EGS4 corresponde a um número mínimo de 5 colisões elásticas (regime *plural*). Abaixo deste valor, o esquema de transporte considera a ocorrência de uma deflexão angular nula [Bielajew et al., 1993]. A dimensão do passo é controlada pela variável `ESTEPE`, que limita a perda fraccional de energia para processos contínuos ou *soft*. No esquema de transporte do código EGS4, a partícula é transportada segundo a direcção inicial, sendo o ângulo de deflexão amostrado no final do passo. Esta metodologia neglegencia o desvio lateral durante o passo, sendo este contabilizado pelo efeito cumulativo de várias dispersões múltiplas. As diferenças entre os momentos obtidos com esta mecânica de transporte e os momentos de Lewis são proporcionais à dimensão do passo [Kawrakow and Bielajew, 1998a]. De modo a assegurar a convergência para a correcta distribuição espacial, os passos devem ser de pequenas dimensões, correspondendo a valores de `ESTEPE` entre 1% e 4%.

O código EGS4 é composto por um conjunto de subrotinas *internas* e de *utilizador* – Figura 2.3.

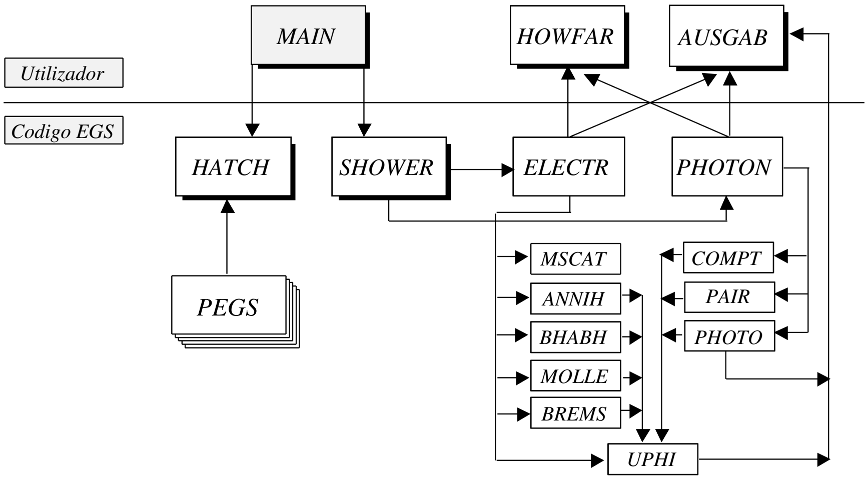


Figura 2.3: Esquema do código de simulação EGS4 dividido nas componentes de *utilizador* e *interno*

O código de utilizador (*user code*) compreende o programa principal, `MAIN`, e as subrotinas `HOWFAR` e `AUSGAB`. Na subrotina `MAIN` são gerados os *eventos primários* e é inicializada a geometria, atribuindo-se um material a cada volume codificado sendo as respectivas secções eficazes e distribuições de perdas de energia armazenadas em estruturas de memória pela subrotina `HATCH`. Cada evento primário é caracterizado por um tipo de partícula identificada pela sua carga (`IQI`=0 para fotões e `IQI`=±1 para positrões e electrões), energia cinética inicial da partícula, coordenadas iniciais na geometria e cosenos directores. O transporte das partículas definidas em cada evento primário, é controlado pela subrotina `SHOWER` através da qual se estabelece a ligação do código de utilizador com o código interno do EGS4. No caso da partícula transportada ser um electrão ou positrão é efectuada uma chamada à subrotina `ELECTR` para selecção do processo físico no final de cada passo: dispersão múltipla (`MSCAT`), *bremsstrahlung* (`BREMS`), dispersão electrão–electrão (`MOLLER`), dispersão positrão–electrão (`BHABHA`) e aniquilação (`ANNH`). O transporte de fotões é da responsabilidade da subrotina `PHOTON`, por chamadas às subrotinas de simulação de dispersão de Compton (`COMPT`), efeito fotoeléctrico (`PHOTO`) e produção de pares (`PAIR`). A inclusão do processo de dispersão elástica de Rayleigh no EGS4 é considerada opcional, sendo assegurada pela subrotina `RAYLE`. Para cada processo de interacção seleccionado, o estado final da partícula transportada é determinado segundo as respectivas secções eficazes. As características cinemáticas de cada evento simulado encontram-se disponíveis na subrotina `AUSGAB` na qual o utilizador pode ainda definir grandezas de interesse para análise. Nas simulações realizadas com este código, a histogramação das grandezas foi efectuada durante a execução do programa através do *package* externo HBOOK contido nas bibliotecas CERNLIB [CERNLIB, 1996].

O transporte de radiação através de geometrias constituidas por diferentes volumes e materiais requer, o conhecimento da localização do electrão ou fotão no final de cada passo e a distância às fronteiras. Deste modo, é possivel modificar as secções eficazes e consequentemente a probabilidade de ocorrência dos diferentes processos de acordo com o material atravessado. A localização e transporte geométrico da partícula (*ray tracing*) é efectuada pela subrotina `HOWFAR`. O código EGS4 não incorpora subrotinas auxiliares de codificação de geometria nem algoritmos para determinação da distância a fronteiras, sendo esta tarefa da responsabilidade do utilizador. Para a codificação de geometrias complexas com elevado detalhe, como aceleradores lineares clínicos para aplicações à Radioterapia, têm sido desenvolvidos vários códigos de utilizador [Udale, 1988, Rogers et al., 1995, Lovelock et al., 1995]. Concretamente neste trabalho, foi adaptado um *package* de geometria combinatória desenvolvido inicialmente para a simulação com EGS4 de um calorímetro electromagnético [Espírito-Santo et al., 1997], permitindo a codificação com recurso a um conjunto de formas geométricas simples: cubos, cilíndros, anéis, esferas, cones e trapezóides genéricos. Na versão do código EGS4 utilizado, procedeu-se à substituição do gerador de números pseudo–aleatórios original RANMAR (período de repetição de 10^{43} extracções) pelo gerador RANLUX (período de repetição de 10^{165} extracções) [James, 1994]. Este, apresenta diferentes *níveis de qualidade* em função do tempo de CPU necessário para a extracção de cada número aleatório tendo sido seleccionado o nível 3.

2.2.2 *GEometry ANd Tracking* – GEANT

O código de Monte Carlo GEANT (*GEometry ANd Tracking*), desenvolvido no periodo de 1982–1997 para simulação de detectores em Física de Altas Energias, é actualmente usado para aplicações em áreas como a Astrofísica, Medicina, Biologia e Radio–protecção [Gianni et al., 1994]. A versão GEANT3 simula o transporte acoplado hadrão–fotão–leptão, contendo secções eficazes dos processos físicos para a gama de energias de 10 keV a 10 TeV. O transporte electromagnético incorpora processos como: efeito fotoeléctrico, dispersão de Compton, produção de pares, aniquilação, produção de *bremsstrahlung* e fotões ópticos de Čerenkov, ionização de partículas carregadas e dispersão múltipla. As secções eficazes para os diferentes processos físicos são obtidas por parametrizações a resultados experimentais contidos nas bibliotecas SANDIA [Biggs and Lighthill, 1987], NIST de Seltzer and Berger [Seltzer and Berger, 1985] e distribuições teóricas. Este código, por defeito, não efectua a geração de raios–δ apresentando um esquema de transporte de classe I. Nestas circunstâncias, os valores de perdas de energia são amostradas a partir da equação de Bethe–Bloch, sendo as flutuações de energia determinadas pelas teorias de Vavilov e Landau de acordo com os seus limites de validade. No entanto, o sistema GEANT3 apresenta a opção de geração explícita de raios–δ com um limiar de produção mínimo de 10 keV comportando-se como um código de Monte Carlo de classe II. As perdas de energia abaixo deste valor são obtidas pela equação de Bethe–Bloch restrita (2.7), sendo as respectivas flutuações amostradas da distribuição de Landau restrita. O código GEANT3 recorre à teoria de Molière para efectuar a amostragem do ângulo de deflexão de partículas carregadas. À semelhança do EGS4, a dimensão do passo é controlada pela perda de energia fraccional por processos contínuos, através da variável `DEEMAX`. Abaixo de um número médio de 20 colisões de Coulomb por passo, esta teoria é substituída pela simulação discreta do ângulo de dispersão utilizando a secção eficaz de Rutherford corrigida para efeitos de blindagem. A mecânica de transporte de electrões e positrões foi desenvolvida segundo a formulação implementada no EGS4, impondo a utilização de baixos valores de `DEEMAX` e dimensões do passo, de modo a minimizar as diferenças entre os momentos calculados e os momentos exactos de Lewis.

O esquema da estrutura das principais subrotinas do código GEANT3, encontra-se na figura 2.4. A inicialização do programa é controlada pelo utilizador na subrotina

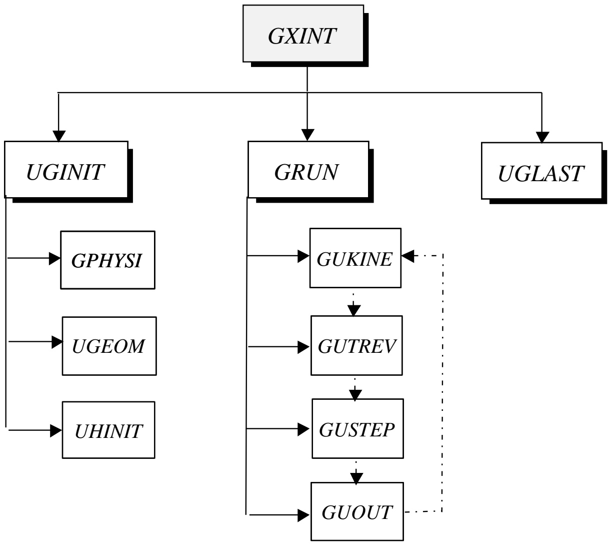


Figura 2.4: Representação da estrutura das principais subrotinas do código de Monte Carlo GEANT3

`UGINIT`. Nesta fase é necessário efectuar a codificação da geometria na subrotina de utilizador `UGEOM` e definir os parâmetros de transporte relativamente aos diferentes materiais. As secções eficazes e tabelas de perda de energia para cada material são construidas na subrotina `GPHYSI`. Na subrotina `UHINIT`, o utilizador declara condições de histogramação para registo de informação e grandezas de interesse. A fase de processamento é iniciada pela subrotina `GRUN`, a qual para cada evento processado, controla um conjunto de subrotinas entre as quais a `GUKINE` responsável pela geração e armazenamento da informação cinemática de cada evento primário, `GUTREV` que inicia o processo de transporte das partículas controlando a propagação através da geometria por chamadas à estrutura `GUTRACK/GTRACK` e a subrotina `GUSTEP`, onde fica armazenada a informação sobre os eventos no final de cada passo da partícula a que o utilizador tem acesso. A subrotina complementar `GUOUT`, contabiliza a informação do processo de simulação no final de cada evento. A fase de finalização encontra-se sob o controlo da subrotina `GULAST`, que efectua a chamada à subrotina `GLAST` para contabilização da informação estatística relacionada com o processo de simulação.

O *package* de geometria do GEANT3 dispõe de 16 formas básicas construídas com superfícies de segunda ordem. Cada volume apresenta a possibilidade de rotação, replicação e divisão em volumes menores. Para codificação de geometrias complexas, este código importa directamente informação CAD (*Computer Aided Designed*). O código GEANT3 contém ainda uma interface gráfica interactiva para visualização da geometria–3D codificada e do transporte de partículas em tempo "real". Opções de *packages* de análise da biblioteca CERNLIB encontram-se também disponíveis, permitindo efectuar a histogramação de resultados durante a execução do programa. Estes contêm o gerador de números aleatórios implementado neste código de simulação, RANECU, caracterizado por um periodo de repetição de 10^{18} extracções.

2.3 Sistemas Dedicados

2.3.1 *Dose Planning Method* – DPM

O crescente interesse da aplicação do método de Monte Carlo à Medicina, associado à incompatibilidade de tempo de CPU dos códigos de simulação generalistas com a práctica clínica, motivou o desenvolvimento dos denominados *sistemas dedicados*. O DPM (*Dose Planning Method*) [Sempau et al., 2000] desenvolvido por Sempau *et al*, é um sistema dedicado a aplicações de cálculo de dose para realização de planeamentos de tratamentos em Radioterapia externa. A elevada eficiência computacional e precisão dos resultados demostrados no cálculo de dose em geometrias homogéneas e geometrias TAC, revelam as suas potencialidades como meio alternativo aos algoritmos analíticos baseados em aproximações à solução da equação de transporte de Boltzmann.

O código DPM simula o transporte acoplado electrão–fotão na gama de energias entre 100 keV a 20 MeV apresentando um esquema de transporte de classe II. A geometria é codificada com recurso a elementos cúbicos ou *voxels*, apresentando um algoritmo simples de *ray–tracing*. Os significativos ganhos em tempo de CPU relativamente aos *sistemas generalistas* derivam essencialmente da utilização de uma mecânica de transporte inovadora, em conjunto com um novo formalismo da teoria de dispersão múltipla para electrões. Como consequência o transporte das partículas é efectuado ao longo de passos de maiores dimensões permitindo atravessar diferentes materiais ignorando a existência de regiões de fronteira. Os aspectos mais relevantes desta abordagem encontram-se resumidos na breve descrição do sistema DPM.

A amostragem da distância entre interacções catastróficas de Møller e emissão de fotões de *bremsstrahlung*, independentemente do número e composição dos *voxels* segundo o percurso da partícula, é efectuada respectivamente, através de:

$$t_{Moller} = -\lambda_{Moller} \ln \xi_1 \tag{2.8}$$

$$t_{Bremss} = -\lambda_{Bremss} \ln \xi_2 \tag{2.9}$$

em que λ_{Moller} e λ_{Bremss} são os livres percursos médios obtidos por interpolação de tabelas pré–calculadas em função da energia para um material de referência que, sem perda de generalidade, pode ser considerado água. ξ_1, ξ_2 são dois números aleatórios compreendidos entre]0,1] fornecidos pelo gerador de números aleatórios implementado no DPM, RANECU. O livre percurso médio para a real composição química do meio é corrigida durante o transporte da partícula, por subtracção das quantidades Δt_{Moller} e Δt_{Bremss}, calculadas por cada *voxel* percorrido:

$$\Delta t_{Moller} = t_{vox} \frac{(Z\rho/A)_{vox}}{(Z\rho/A)_{agua}} \tag{2.10}$$

$$\Delta t_{Bremss} = t_{vox} \frac{(Z^2\rho/A)_{vox}}{(Z^2\rho/A)_{agua}} \tag{2.11}$$

em que t_{vox} é o percurso do electrão num *voxel* equivalente de água, Z é o número atómico, A número de massa e ρ a densidade do material. Esta iteracção é repetida até que uma das distâncias t_{Moller} ou t_{Bremss} se anule, sendo simulado o respectivo evento catastrófico[6]. Esta abordagem é válida no limite relativista, $E \gg mc^2$, e de baixas transferências de energia para partículas secundárias, em que existe uma fraca dependência dos livres percursos médios de Møller e de *bremsstrahlung* com a energia – Figura 2.5. Estes apresentam uma dependência simples com a composição do meio, podendo ser expressos na forma:

$$\lambda_{Moller} \approx \frac{A}{Z\rho} \frac{mc^2 \Delta_{Moller}}{N_A 2\pi e^4} \tag{2.12}$$

$$\lambda_{Bremss} \approx \frac{A}{Z^2 \rho N_A a} \left(\ln \frac{E}{\Delta_{Bremss}} - b \right)^{-1} \tag{2.13}$$

[6]Se a geometria for homogénea e constituída pelo meio de referência – água – a distância percorrida entre dois eventos discretos será coincidente com t_{Moller} ou t_{Bremss}

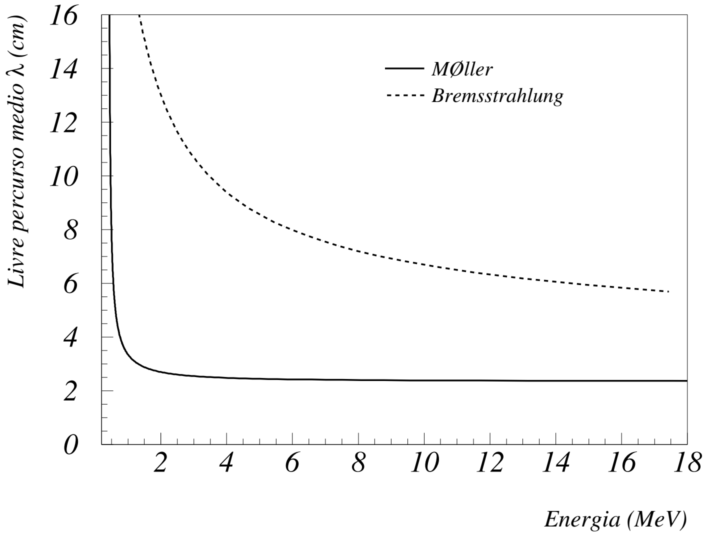


Figura 2.5: Dependência dos livres percursos médios de Møller e *bremsstrahlung* com a energia, para limiares de produção de partículas secundárias de 50 keV e 200 keV respectivamente, em água

em que E é energia da partícula carregada transportada, Δ_{Moller} e Δ_{Bremss} são os valores da energia de corte definidas para a produção de raios–δ e fotões de *bremsstrahlung* e a e b são parâmetros de ajuste às secções eficazes diferenciais em energia do fotão emitido obtidas por Seltzer e Berger [Seltzer and Berger, 1985]. No final de cada interacção discreta, os livres percursos médios são recalculados tomando em conta as novas características cinemáticas da partícula. Entre dispersões inelásticas catastróficas, este código apresenta uma mecânica de transporte mais eficiênte caracterizada por passos de maiores dimensões, possibilitada pela implementação de uma nova derivação da teoria de dispersão múltipla de Goudsmit–Saunderson [Goudsmit and Saunderson, 1940] reformulada por Lewis [Lewis, 1950] e proposta por Bielajew e Kawrakow [Kawrakow and Bielajew, 1998b]. A distribuição angular obtida por Lewis incorporando perdas de energia ao longo do passo, s, é dada por:

$$F(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \sum_{l=0}^{\infty}\left(l+\frac{1}{2}\right)P_l(\cos\theta)\exp\left[-\int_{E-\Delta E}^{E}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\Delta}^{-1} G_l\, dE\right]\sin\theta d\theta \tag{2.14}$$

onde $G_l = g_l/\lambda$, λ é o livre percurso médio entre interacções elásticas. Os coeficientes g_l, são obtidos a partir da expansão da secção eficaz diferencial em ângulo de dispersão elástica segundo polinómios de Legendre. Bielajew e Kawrakow demonstraram que para a implementação em códigos de Monte Carlo de classe II, a distribuição de Goudsmit–Saunderson–Lewis pode ser convenientemente descrita por:

$$F(\cos\theta)\sin\theta d\theta = q(u,E)\frac{2B(1+B)}{(1+2B-\cos\theta)^2}\sin\theta d\theta \qquad (2.15)$$

em que B é um parâmetro livre, u é uma variável angular e em que $q(u,E)$ depende da energia do electrão, da secção eficaz de dispersão elástica e do coeficiente B. Esta função é pré–calculada pelo código DPM a partir da secção eficaz de Rutherford corrigida por efeitos de blindagem e de *spin* para um conjunto de pares de valores de energia e u em água, permitindo obter de forma rápida o ângulo polar a partir de uma simples interpolação de $q(u,E)$. É possivel demostrar que este formalismo conduz a uma distribuição angular válida nos regimes de dispersão *múltipla*, *plural* e *singular*, garantindo sempre a convergência para uma solução estável para qualquer dimensão de passo. A não dependência da estabilidade da distribuição angular com a dimensão do passo, permitiu a utilização do método de transporte *random hinge* [Bielajew and Salvat, 2001] inovador em relação aos esquemas de transporte convencionais descritos anteriormente. O processo consiste em dividir o passo em dois segmentos com base na grandeza *scattering strenght*, $K_{l=1}$, função da energia inicial do electrão. Esta é definida como a integração do primeiro coeficiente $G_{l=1}$ da distribuição angular de Goudsmit–Saunderson ao longo de um passo em água de dimensão fixa e pré–estabelecida (valores típicos de 0.5 cm para um electrão de 10 MeV). Para cada segmento (A e B) são determinados valores de $K^A_{l=1} = \xi K_{l=1}$ e $K^B_{l=1} = K_{l=1} - K^A_{l=1}$ sendo ξ um número aleatório – Figura 2.6. O electrão é

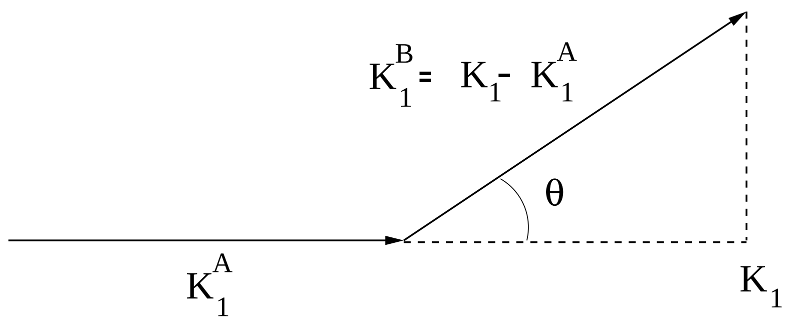


Figura 2.6: Representação do transporte de um electrão ao longo de um passo de história condensada pela técnica de *random hinge*

transportado pelo primeiro segmento segundo a sua direcção inicial sendo para cada *voxel* contabilizada a quantidade $\Delta K = \int_0^{t_{vox}} G_{l=1}^{vox}\, dt$, determinada para o material do respectivo *voxel*, e subtraída ao valor inicial de *scattering strenght*. Quando a distância correspondente ao valor de $K_{l=1}^{A} = 0$ é atingida a amostragem do ângulo de deflexão é efectuada a partir da distribuição de Kawrakow–Bielajew. Adoptando a mesma metodologia, o electrão é transportado pelo segundo segmento até que se verifique a condição $K_{l=1}^{B} = 0$. No final de cada passo são calculadas as perdas de energia de acordo com os materiais atravessados pelo electrão pelas respectivas distribuições restrictas de perda de energia. Esta mecânica de transporte permite descrever correctamente a trajectória dos electrões até à sua absorção no meio, recorrendo apenas 8 a 10 passos de história condensada, em comparação com os esquemas de transporte implementados nos código generalistas que requerem *múltiplos passos por cada voxel atravessado*. Tal só é possível, pelo facto do algoritmo *random hinge* ser exacto, isto é, preservar os momentos de Lewis para a profundidade de penetração, o desvio lateral e outros momentos espaciais e angulares, independentemente da dimensão do passo.

A simulação *análoga* requer que, a distância à próxima interacção seja recalculada cada vez que o fotão atravessa uma fronteira entre diferentes materiais, o que ocorre frequentemente em estruturas *voxelizadas* ao longo de pequenas distâncias representando uma significativa perda de eficiência no processo de transporte. Em alternativa, o transporte de fotões pelo código DPM recorre ao método de Woodcock no qual, a distância à próxima interacção é amostrada a partir de um livre percurso médio fictício correspondente ao mínimo livre percurso médio entre todos os materiais da geometria, λ_{γ}^{min}. Nestas condições o fotão é transportado ignorando todas as fronteiras e materiais atravessados até ao vértice de interacção, no qual é calculada a probabilidade de ocorrência do evento, dada por:

$$Prob = \frac{\lambda_{\gamma}^{min}}{\lambda_{\gamma}^{vox}} \tag{2.16}$$

em que λ_{γ}^{vox} é o livre percurso médio para o material atribuido ao *voxel* que contém o vértice. O processo de interacção é considerado fícticio para a condição $\xi > Prob$, sendo amostrada uma nova distância. Caso contrário é simulada uma interacção real de acordo com as respectivas probabilidades determinadas pelas secções eficazes totais dos processos.

Referências

[Andreo, 1991] Andreo, P. (1991). Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Phys. Med. Biol.*, 36(7):861–920.

[Bielajew, 2000] Bielajew, A. F. (2000). Electron step–size dependence and transport mechanics in Monte Carlo condensed history calculations. Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications – Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23–26 October 2000, Tutorial Note EG–3.

[Bielajew et al., 1994] Bielajew, A. F., Hirayama, H., Nelson, W. R., and Rogers, D. W. O. (1994). History, overview and recent improvements of EGS4. Technical Report NRC–PIRS–0436, KEK Internal 94–4, SLAC–PUB–6499, National Research Council of Canada.

[Bielajew and Salvat, 2001] Bielajew, A. F. and Salvat, F. (2001). Improved electron transport mechanics in the PENELOPE Monte–Carlo model. *Nucl. Instrum. Methods B*, 173:332–43.

[Bielajew et al., 1993] Bielajew, A. F., Wang, R., and Duane, S. (1993). Incorporation of single elastic scattering angle in the EGS4 Monte Carlo code system: Tests of Molière theory. *Nucl. Instrum. Methods B*, 82:503–12.

[Biggs and Lighthill, 1987] Biggs, F. and Lighthill, R. (1987). Analytical approximations for x-ray cross sections. Technical report, Sandia National Laboratory. SAND87–0070 UC–34.

[CERNLIB, 1996] CERNLIB (1996). *CERN Program Library.* CERN – European Organization for Nuclear Research. Short Writeups.

[Espírito-Santo et al., 1997] Espírito-Santo, M. C., Maio, A., Peralta, L., Pimenta, M., and Tomé, B. (1997). Fast simulation of an electromagnetic calorimeter:

a two stage approach. Technical Report DELPHI 97–42 CAL 136, DELPHI Collaboration. http://www.lip.pt/∼dellip/papers/delphi-notes.html.

[Gianni et al., 1994] Gianni, S., Ravndal, S., and Maire, M. (1994). *GEANT – Detector Description and Simulation Tool*. CERN – European Organization for Nuclear Research, October edition. CERN Program Library Long Writeup W5013.

[Goudsmit and Saunderson, 1940] Goudsmit, S. and Saunderson, J. L. (1940). Multiple Scattering of Electrons. *Phys. Rev.*, 57:24–9.

[ICRU, 1984] ICRU (1984). *Stopping Powers for Electrons and Positrons*. ICRU – International Comimission On Radiation Units and Measurements. Report 37.

[James, 1994] James, F. (1994). FORTRAN implementation of the high–quality pseudorandom number generator of Lüsher. *Computer Phys. Commun.*, 79:111–14.

[Jenkins et al., 1989a] Jenkins, T. M., Nelson, W. R., Rindi, A., Nahum, A. E., and Rogers, D. W. O., editors (1989a). *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, chapter 2, Multiple–scatering angular deflections and energy–loss straggling, pages 21–56. Plenum Press, New York.

[Jenkins et al., 1989b] Jenkins, T. M., Nelson, W. R., Rindi, A., Nahum, A. E., and Rogers, D. W. O., editors (1989b). *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, chapter 12, Structure and operation of the EGS4 code system, pages 287–305. Plenum Press, New York.

[Kawrakow and Bielajew, 1998a] Kawrakow, I. and Bielajew, A. F. (1998a). On the condensed history technique for electron transport. *Nucl. Instrum. Methods B*, 142:253–80.

[Kawrakow and Bielajew, 1998b] Kawrakow, I. and Bielajew, A. F. (1998b). On the representation of electron multiple elastic– scattering distributions for Monte Carlo calculations. *Nucl. Instrum. Methods B*, 134:325–36.

[Kling et al., 2001] Kling, A., Barão, F., Nakagawa, M., Távora, L., and Vaz, P., editors (2001). *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport*

Simulation and Applications – Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23–26 October 2000. Springer–Verlag.

[Leo, 1986] Leo, W. R. (1986). *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, chapter 2, pages 34–50. Springer–Verlag.

[Lewis, 1950] Lewis, H. W. (1950). Multiple scattering in an infinite medium. *Phys. Rev.*, 78(5):526–9.

[Lovelock et al., 1995] Lovelock, D. M. J., Chui, C. S., and Mohan, R. (1995). Monte Carlo model of photon beams used in radiation therapy. *Phys. Med. Biol.*, 22:1387–94.

[Nelson et al., 1985] Nelson, W. R., Hirayama, H., and Rogers, D. W. O. (1985). *The EGS4 Code System*. Stanford Linear Accelerator Report, Stanford, California. SLAC–265.

[Rogers et al., 1995] Rogers, D. W. O., Faddegon, B. A., Ding, C. X., Ma, C.-M., We, J., and Mackie, T. R. (1995). BEAM: a Monte Carlo to simulate radiotherapy units. *Med. Phys.*, 22:503–24.

[Salicio, 1985] Salicio, J. (1985). Monte Carlo techniques. Technical report, Deutsches Elektronen–Synchrotron DESY.

[Salvat et al., 1999] Salvat, E., Fernández-Varea, J. M., and Sempau, J. (1999). Practical aspects of Monte Carlo simulation of charged particle transport: Mixed algorithms and variance reduction techniques. *Radiat. Environ. Biophys.*, 38:15–22. Review Article.

[Seltzer and Berger, 1985] Seltzer, S. M. and Berger, M. J. (1985). Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons. *Nucl. Instrum. Methods B*, 12:95–134.

[Sempau et al., 2000] Sempau, J., Wilderman, S. J., and Bielajew, A. F. (2000). DPM, a fast accurate Monte Carlo code optimized for photon and electron radiotherapy treatment planning dose calculations. *Phys. Med. Biol.*, 45:2263–91.

[Trubey et al., 1988] Trubey, D. K., Berger, M. J., and Hubbell, J. H. (1988). Photon Cross Sections for ENDF/B-IV. Technical Report DLC-0136/01, Oak

Ridge National Laboratory and National Institute of Standards and Technology (NIST).

[Udale, 1988] Udale, M. (1988). A Monte Carlo investigation of surface doses for broad electron beams. *Phys. Med. Biol.*, 33:939–54.

[Wilson, 1952] Wilson, R. R. (1952). Monte Carlo of shower production. *Phys. Rev.*, 86:261–9.

Capítulo 3

Simulação do Acelerador Linear Siemens Mevatron KD2

Este capítulo apresenta a descrição da simulação de feixes de electrões produzidos por um acelerador linear Siemens Mevatron KD2. Numa primeira fase, o objectivo centra-se na geração de espaços de fases representativos do feixe de electrões e estudo detalhado da sua evolução ao longo da geometria do acelerador. Detalhes da interacção do feixe com as diferentes componentes constituintes da cabeça de tratamento são analisados por simulação, surgindo como uma alternativa à verificação experimental directa. A escolha de dois códigos de Monte Carlo, EGS e GEANT, permite em simultâneo com a caracterização do feixe, uma avaliação dos modelos físicos incorporados nos códigos de simulação. A intercomparação dos resultados obtidos e a análise das potencialidades de cada código, levou à escolha da melhor opção para aplicações de cálculo de dose.

A segunda fase da simulação do acelerador consiste na validação dos espaços de fases gerados para várias energias de feixe. Curvas de dose em profundidade e perfis de dose foram simuladas e comparadas com dados experimentais obtidos num *fantoma* homogéneo de água.

3.1 Descrição do Acelerador Siemens KD2 em Modo Electrões

O Siemens Mevatron KD2 é um acelerador linear (*linac*) para aplicações clínicas em Radioterapia externa. Apresenta um modo de funcionamento dual, possibilitando as modalidades terapêuticas com feixes de electrões e com feixes de fotões. Em modo electrões este acelerador produz feixes de energias nominais de 6, 8, 10, 12, 15 e 18 MeV. Os campos de radiação extensos disponiveis são: circular com raio de 5 cm, e quadrados 10×10 cm^2, 15×15 cm^2, 20×20 cm^2 e 25×25 cm^2 definidos no plano de tratamento a uma distância de 100 cm da fonte primária de electrões - SSD (*Source to skin distance*).

O acelerador Siemens KD2 tem uma estrutura ou sistema de aceleração primário responsável pela produção de feixes de electrões de elevada intensidade. Esta tem como componente principal o guia de ondas [Klevenhagen, 1985a], com cavidades ressonântes que permitem acelerar electrões emitidos por uma fonte primária, até energias da ordem do megavolt. Os electrões são emitidos da fonte primária por processo termoiónico e acelerados até uma energia de aproximadamente 15 keV, por uma diferença de potencial constante. A sua injecção na estrutura de aceleração dá-se em simultâneo com pulsos de radiofrequências, usados para estabelecer uma onda electromagnética que se propaga ao longo do guia de ondas. A componente longitudinal do campo eléctrico variável fica em fase com os electrões provocando a sua aceleração com um ganho contínuo de energia. As elevadas frequências (3 000 MHz) necessárias para o processo de aceleração, são produzidas por um sistema *klystron* – Figura 3.1. O *klystron* funciona como um amplificador de microondas [Hendee, 1999]. O processo de amplificação inicia-se na cavidade de aceleração do *klystron*, onde electrões emitidos por uma fonte secundária são injectados em simultâneo com microondas de baixa potência. A presença do potencial alternado gerado conduz à formação de "pacotes" (*bunch*) de electrões. Estes são em seguida desacelerados na cavidade colectora do *klystron*, emitindo pulsos de microondas de elevada potência, que são transportados até ao tubo de aceleração através de guias de ondas.

No final da estrutura de aceleração a aplicação de um campo magnético transversal

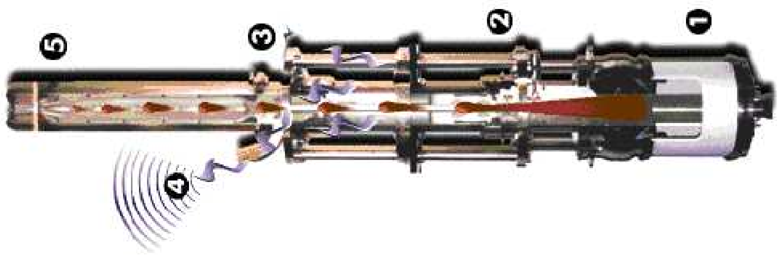


Figura 3.1: Esquema de funcionamento de um sistema *klystron*. Fonte secundária (1), cavidades de aceleração (2), formação de "pacotes" de electrões (3), pulsos de microondas (4) e cavidade colectora (5)

(1.7 T) por um íman deflector (*bending magnet*), faz encurvar a trajectória do feixe em direcção ao plano de tratamento. O sistema de deflexão magnético do acelerador Siemens KD2 é "acromático", correspondendo a uma curvatura da trajectória do feixe de electrões de 270° [Siochi, 2001]. Tal permite a focagem do feixe reduzindo a sua dispersão radial e angular à saída de uma janela de berílio que marca a separação entre a estrutura de aceleração e a cabeça de tratamento do acelerador linear.

O acelerador Siemens KD2 dispõe de uma estrutura para produção de feixes terapêuticos de electrões designada por cabeça de tratamento, constituída por subestruturas de colimação, modelação e monitorização do feixe de radiação – Figura 3.2. O feixe de electrões que emerge da janela de berílio apresenta uma dispersão radial de apenas alguns milímetros, não sendo viável a sua aplicação para fins terapêuticos. O feixe incide numa estrutura de dispersão primária contituída por uma folha de ouro ou aço com a qual os electrões interagem, em primeira ordem, por dispersão elástica de Coulomb e ionização. Após múltiplas dispersões elásticas os electrões sofrem uma deflexão angular média, afastando-se do eixo central, levando ao aumento da secção transversal do feixe. A escolha da espessura e material da folha é um compromisso entre o aumento da secção transversal, a perda de energia do feixe de electrões e a produção de fotões *bremsstrahlung* contaminantes. Devido à dependência da probabilidade de dispersão dos electrões com a energia e espessura de material dispersor, o acelerador dispõem de um conjunto de folhas com diferentes espessuras, que são seleccionadas de forma automática de acordo

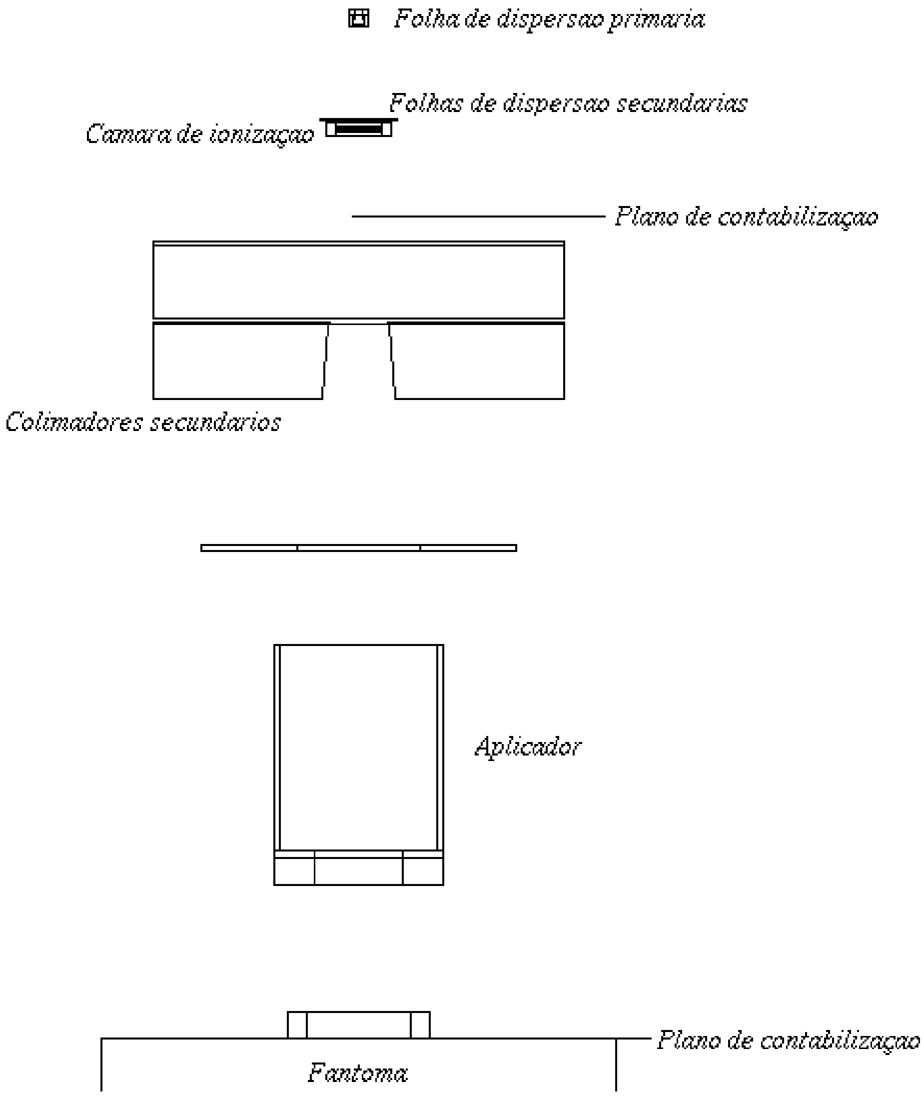


Figura 3.2: Corte longitudinal da cabeça de tratamento do acelerador Siemens Mevatron KD2 em modo de tratamento com feixes de electrões

com a energia do feixe proveniente do sistema de aceleração primário – Tabela 3.1[1].

$E_{nominal}$ (MeV)	Material	Espessura (μm)
6	Aço	25.4
8	Aço	76.2
10	Ouro	50.8
12	Ouro	101.6
15	Ouro	203.2
18	Ouro	203.2

Tabela 3.1: Materiais e espessuras da folha de dispersão primária para as energias dos feixes de electrões produzidos pelo acelerador Siemens KD2

A folha de dispersão primária é suportada por paredes metálicas de intermédio e elevado número atómico (*ledloy* e latão) [2], servindo de blindagem à contaminação de raios-X produzidos durante a interacção dos electrões com a folha de ouro. Uma segunda estrutura de dispersão encontra-se localizada a aproximadamente 10 cm da primeira folha de dispersão. É composta por três discos ou folhas de alumínio em forma de cones truncados. Estas apresentam diferentes raios (0.4 cm, 0.9 cm e 1.4 cm) e encontram-se sobrepostas, formando uma geometria em "escada" assente numa fina folha de *kapton*[3]. A folha de *kapton* encontra-se suportada pelas paredes interiores de uma estrutura cilíndrica oca em alumínio com um raio interior e exterior de 2.22 e 3.81 cm respectivamente. A sua função é homogeneizar o feixe através de um processo de absorção e dispersão diferencial dos electrões. A região central do feixe é preferencialmente absorvida e dispersa em relação à região periférica. A intensidade do feixe dentro da cabeça de tratamento é controlada por um sistema de monitorização constituído por uma câmara de ionização multi-seccional. No acelerador Siemens KD2, esta é constituída por um conjunto de folhas de *kapton* com 25 μm, sobre as quais foram electrodepositadas camadas de ouro com 50 nm de espessura, que servem de colector de sinal. As paredes da câmara são em aço inoxidável apresentando uma geometria cilíndrica de raio interior 2.20 cm e raio exterior 3.18 cm. A câmara foi concebida de forma a ter uma pequena sensibilidade a raio-X contaminante e simultaneamente evitar a degradação da energia do feixe

[1] Informação cedida pela Siemens *AG Medical Engineering*

[2] *Ledloy* composto de ferro e chumbo e *yelbrass* composto de cobre e zinco

[3] Constituição química: $C_{22}H_{10}N_2O_5$

de electrões. A existência de um sistema de colimação secundário após as estruturas de modelação, permite a remoção de electrões de ângulos polares elevados do feixe primário, fazendo uma pré–selecção da região do campo de radiação com interesse clínico. Os colimadores (superior e inferior) são constituídos por quatro blocos de tungsténio móveis com uma espessura de 10 cm. As posições relativas dos colimadores secundários definem as dimensões dos diferentes campos de radiação do acelerador.

A colimação do feixe de electrões para formação de um campo de radiação bem definido não pode ser encarado como um problema puramente geométrico. A elevada dispersão dos electrões para energias inferiores a 15 MeV, ao atravessarem sucessivas camadas de ar, impõe a existência de um sistema de colimação adicional, designado por aplicador. Desta forma, para cada campo de radiação existe um aplicador externo que colima o feixe desde o sistema de colimação secundário até à superfície de irradiação. Os aplicadores externos são geralmente construidos com materiais de números atómicos intermédios, por forma a colimar o feixe de electrões minimizando a produção de fotões contaminantes. Os aplicadores usados no acelerador Siemens KD2 são em alumínio, apresentando uma fina blindagem em aço no final do "corpo" do aplicador – Figura 3.3. Para uma delimitação mais precisa do campo de radiação, são colocados blocos de colimação adicionais (*cutouts*) na última componente do aplicador – Figura 3.4. Esta permite uma melhor adaptação do aplicador a irregularidades existentes na superfície de irradiação. A liga metálica (*cerrobend*)[4] utilizada no processo de moldagem dos *cutouts* apresenta um baixo ponto de fusão, permitindo delimitar geometrias irregulares e uma elevada densidade de modo a atenuar o feixe de radiação.

[4]Composto por bismuto (52.0%), chumbo (32.0%), estanho (15.0%) e cádmio (0.4%). Informação cedida pelo Instituto Tecnológico e Nuclear – ITN

Figura 3.3: Acelerador linear Siemens Mevatron KD2 com o aplicador externo de electrões correspondente ao campo de radiação 10×10 cm^2. *Imagem cedida por IPOFG-CROC*

Figura 3.4: Blocos de colimação adicionais para definição de campos de radiação regulares e irregulares moldados em *cerrobend*. *Imagem cedida por IPOFG-CROC*

3.2 Obtenção de Espaços de Fases

A geometria do acelerador Siemens KD2 em modo de tratamento com electrões foi codificada em dois programas de simulação de Monte Carlo: EGS (versão 4.3.2) e GEANT (versão 3.21). A estrutura de aceleração não foi simulada neste estudo usando-se apenas as características do feixe de electrões ao nível da janela de berílio para a simulação do campo de radiação produzido na cabeça de tratamento. As dimensões e materiais de cada componente do acelerador foram modeladas segundo as especificações fornecidas pelo fabricante. A geometria foi dividida em dois módulos. O primeiro engloba as folhas de dispersão primária e secundária e a câmara de ionização, e o segundo módulo inclui os colimadores secundários e o aplicador externo. No final de cada módulo adquiriram-se espaços de fases em planos de contabilização pré-definidos, perpendiculares ao eixo de radiação de dimensões 25×25 cm^2 – Figura 3.2. As variáveis guardadas nestas distribuições a N dimensões (*Ntuples*) [Brun, 1994] são: energia, coordenadas espaciais, cosenos directores e a identificação do tipo de partícula (electrão, fotão ou positrão). Estas caracterizam o estado cinemático da partícula no respectivo plano de contabilização.

O feixe de electrões primário produzido na estrutura de aceleração é descrito como uma fonte pontual de electrões monoenergéticos, localizada a 100 cm do plano de tratamento imediatamente após a janela de berílio. O modelo de fonte pontual monoenergética para simulações de feixes de electrões produzidos por aceleradores em Radioterapia externa tem sido amplamente utilizado por diversos autores [Udale-Smith, 1992, Rogers et al., 1995, Ding and Rogers, 1995]. Estudos comparativos de cálculos de dose com este modelo relativamente a modelos mais refinados, incluindo fontes com dispersão espacial, angular e em energia, foram efectuados. As conclusões indicam uma pequena influência destes parâmetros iniciais do feixe na precisão das simulações em face de outros aspectos como a codificação da geometria ou a modelação dos processos de transporte [Ma and Jiang, 1999].

Os electrões emitidos pela fonte atravessam a folha de dispersão primária e todas as partículas resultantes da interacção com o material são transportadas através das diferentes estruturas do acelerador, até ao plano de contabilização no final do primeiro módulo, localizado a 20 cm da fonte primária de electrões. Numa segunda fase de simulação, o transporte das partículas guardadas no espaço de fases anterior é efectuado através do segundo módulo até ao plano de contabilização localizado a 100 cm SSD. Neste estudo foram adquiridos espaços de fases para as energias de feixe produzidas pelo acelerador Siemens KD2, para o campo de radiação de 10×10 cm^2. A energia média do feixe de electrões primário logo após a janela de berílio não é conhecida com precisão e não coincide necessáriamente com a energia nominal especificada pelo fabricante. Embora a medição directa da energia de feixe à saída da estrutura de aceleração primária tenha sido efectuado com um detector de Čerenkov gasoso, tal não é compatível com a prática clínica [Klevenhagen, 1985b]. Desta forma, efectuou-se um estudo preliminar para determinação dos valores de energia exacta para a simulação. O procedimento adoptado consistiu na modificação progressiva da energia da fonte pontual de electrões, partindo da energia nominal. O critério de ajuste final da energia foi a comparação das curvas de dose em profundidade simuladas com dados experimentais para cada energia de feixe [Sempau et al., 2001]. Os valores das energias encontradas e utilizadas em ambos os códigos de simulação foram: 6.25 (6 MeV nominal), 8.00 (8 MeV nominal), 10.26 (10 MeV nominal), 12.12 (12 MeV nominal), 15.51 (15 MeV nominal) e 18.73 (18 MeV nominal) MeV. Por forma a obter uma boa amostra estatística do feixe de radiação no final de cada módulo, estima-se que seja necessário simular um total de 1×10^7 histórias para cada energia de feixe [Ma and Jiang, 1999].

3.2.1 Parâmetros de Simulação

A simulação Monte Carlo com os códigos EGS4 e GEANT3 envolve a optimização de parâmetros relacionados com os processos de transporte – Tabela 3.2. A tra-

EGS4	Valor	GEANT3	Valor
`ESTEPE`	0.5–1%	`DEEMAX`	0.3–1%
`AE` – acelerador	10 keV	`DCUTE`	10 keV
`AE` – *fantoma*	1 keV		
`AP`	10 keV	`BCUTE`	10 keV
`ECUT` – acelerador	189 keV	`CUTELE` – acelerador	189 keV
`ECUT` – *fantoma*	10 keV	`CUTELE` – *fantoma*	10 keV
`PCUT`	10 keV	`CUTGAM`	10 keV

Tabela 3.2: Parâmetros de transporte do código EGS4 e GEANT3

jectória de cada partícula, primária ou secundária é simulada, e o seu transporte efectuado ao longo da geometria codificada. Quando a energia da partícula é inferior ao valor de corte em energia estabelecido nos códigos de simulação, o seu transporte é interrompido, sendo a sua energia depositada localmente. Os valores de corte em energia para o transporte de electrões (`ECUT`) e fotões (`PCUT`) para o código EGS4 são respectivamente 189 keV (energia cinética) e 10 keV para as simulações efectuadas no interior do acelerador, e 10 keV (energia cinética) e 10 keV no *fantoma* de água. No GEANT3 foram utilizados valores de corte em energia semelhantes (parâmetros `CUTELE` e `CUTGAM`). Nos dois códigos de simulação utilizados a contabilização das perdas de energia por ionização e processos radiativos é efectuada por geração explícita de raios–δ e *bremsstrahlung* respectivamente, acima do limiar de produção de partículas secundárias: `AE` e `DCUTE` para electrões e `AP` e `BCUTE` para fotões. Abaixo deste limiar as flutuações às perda de energia por interacções *soft* no código GEANT3 são amostradas de uma distribuição restricta de Landau, `GLANDZ` [Gianni et al., 1994]. Para o EGS4 as perdas de energia abaixo do limiar de produção não incluem flutuações estocásticas sendo o seu valor fixado pela variável `ESTEPE`. Neste código, foram considerados limiares de produção de partículas secundárias carregadas (`AE`) e de fotões (`AP`) respectivamente a 10 keV (energia cinética) e 10 keV. Na simulação do *fantoma* de água o parâmetro `AE` foi colocado a 1 keV. Tal garante a correcta contabilização das perdas de energia na ordem dos 50 keV para o código EGS4. A utilização de valores de `AE` superiores ($>$ 10 keV) subestima o número de interacções discretas durante o transporte de electrões, refletindo-se num aumento da perda de energia em 4% [Rogers, 1984]. Tal efeito, apesar de desprezável na simulação da cabeça de tratamento, conduz a alterações nas distribuições de dose calculadas em água. Os limiares de produção utilizados no GEANT3 definidos pelos parâmetros `DCUTE` e `BCUTE` foram colocados a 10 keV. No código GEANT3, a fracção de energia perdida devido a interacções *soft* por passo para electrões (`DEEMAX`) foi colocado a 0.3% - 0.5% para materiais de elevado número atómico e 1% para materiais de número atómico intermédio. O valor do parâmetro correspondente para o código EGS4 (`ESTEPE`) foi fixado a 0.5% nas simulações efectuadas para a obtenção de espaços de fases do acelerador e 1% para o cálculo de dose no *fantoma*. A escolha e optimização destes valores foi baseada em estudos preliminares de simulação ou sugeridos pelo trabalho de outros autores [Trindade et al., 2001, Rogers et al., 1995].

O algoritmo complementar de transporte de electrões – PRESTA – do código EGS4 [Bielajew and Rogers, 1987] não foi implementado, e nenhum método de redução de variância foi utilizado nas simulações efectuadas. No código GEANT3 apenas foram considerados processos electromagnéticos: efeito fotoelétrico, dispersão de Compton, produção de pares, raios-δ e fotões de *bremsstrahlung*, e aniquilição de positrões. Não foram considerados processos de foto–produção de neutrões em elementos como o ouro, alumínio e tungsténio, devido à baixa secção eficaz de produção [Klevenhagen, 1985c].

3.3 Caracterização do Feixe de Electrões

A análise e caracterização dos feixes de electrões produzidos pelo acelerador Siemens KD2 é efectuada para a energia de 10 MeV para o campo de radiação 10×10 cm^2 com os códigos de simulação EGS4 e GEANT3. Este estudo compreende a obtenção de espaços de fases do feixe de electrões e análise da sua evolução e modelação ao longo das diferentes estruturas do acelerador. A validação dos espaços de fases é efectuada de forma indirecta por comparação do cálculo de dose do campo de radiação gerado por simulação com dados experimentais medidos num *fantoma* homogéneo de água. A elevada intensidade dos feixes produzidos pelos aceleradores lineares (cerca de 0.1 μA) impossibilitam medições experimentais de espectros de energia ou distribuições angulares. Desta forma, a escolha de dois códigos de simulação de Monte Carlo permitiu um reforço da validação dos resultados obtidos no interior da cabeça de tratamento, assim como representa uma alternativa à medição experimental directa.

A análise das *Ntuples* no final de cada módulo de simulação é complementada com informação recolhida em níveis intermédios e guardada em histogramas durante a execução dos programas de simulação, permitindo um maior detalhe no estudo da evolução do feixe. A histogramação é obtida com o *package* HBOOK [Brun, 1994] no qual eventos podem ser guardados em histogramas uni ou bidimensionais, segundo condições previamente definidas pelo utilizador. A histogramação não apresenta o carácter dinâmico das *Ntuples*, no entanto permite uma redução considerável no espaço de disco necessário para armazenamento dos dados. Os níveis intermédios considerados ficam localizados no primeiro módulo após a estrutura da folha de dispersão primária e das folhas de dispersão secundárias. A caracterização do feixe de electrões é também efectuada no final de cada módulo (câmara de ionização e a 100 cm SSD). As distribuições consideradas para a caracterização do feixe são: espectros de energia, energia média e fluência de electrões e fotões de contaminação. O programa de análise de dados PAW (*Physics Analysis Workstation*) [Brun et al., 2000] foi utilizado para aquisição das distribuições características do campo de radiação simulado, a partir dos espaços de fases com a utilização de funções de selecção. Este programa de análise permite a contabilização dos erros associados a cada distribuição. Para os espectros de energia o erro estatístico para um canal com N entradas é dado por $\sqrt{N}$. Para distribuições de energia média, o erro do valor médio por canal com N entradas é dado por:

$$s_m = \frac{\sigma_E}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{1}{((N)(N-1))}\sum_{i=1}^{N}(E_i - \bar{E})^2} \tag{3.1}$$

em que E_i e $\bar{E}$ são respectivamente a energia da partícula i e a energia média em cada canal. O erro nas distribuições de fluência é estimado por $\frac{\sqrt{N}}{A}$ em que A é a área da célula de contabilização e N é o número de partículas contidas em cada célula. A intercomparação dos resultados obtidos com os códigos EGS4 e GEANT3 é efectuada em simultâneo com a caracterização do feixe.

3.3.1 Folha Dispersora Primária

A estrutura dispersora primária do acelerador Siemens KD2 está esquematizada em pormenor na figura 3.5, onde é possivel observar a folha de ouro seleccionada para a energia 10 MeV e toda a estrutura de suporte. Os dados de simulação são analisados no final da estrutura de suporte, a uma distância de 1.57 cm da fonte de electrões. O feixe primário com energia inicial 10.26 MeV sofre um processo de degradação após a interacção dos electrões com a folha de dispersão primária, originando um espectro de electrões característico e um espectro continuo de fotões de *bremsstrahlung*. Os histogramas dos espectros de electrões e fotões – Figura 3.6 – estão normalizados ao número total de eventos simulados. Este tipo de normalização coloca em evidência as diferenças existentes entre os resultados das simulações efectuadas com EGS4 e GEANT3 que poderiam ser ocultadas com a escolha de uma normalização por área ou ao máximo da distribuição. Desta

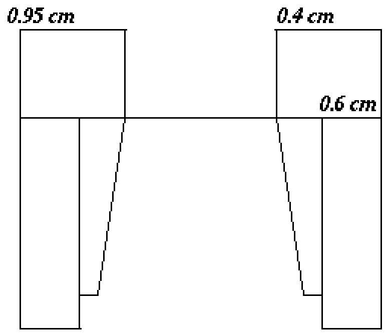


Figura 3.5: Esquema da folha de dispersão primária e estrutura de suporte

forma poderão ser estabelecidas relações entre os modelos físicos implementados nos códigos de Monte Carlo e as potenciais diferenças encontradas. A energia mais provável do espectro de electrões para ambos os códigos é de 10.1480 $\pm$ 0.0003 MeV. As energias médias encontradas são 9.9290 $\pm$ 0.0003 MeV para o EGS4 e 9.9170 $\pm$ 0.0003 MeV para o GEANT3. A diferença de 12.0 keV entre as energias

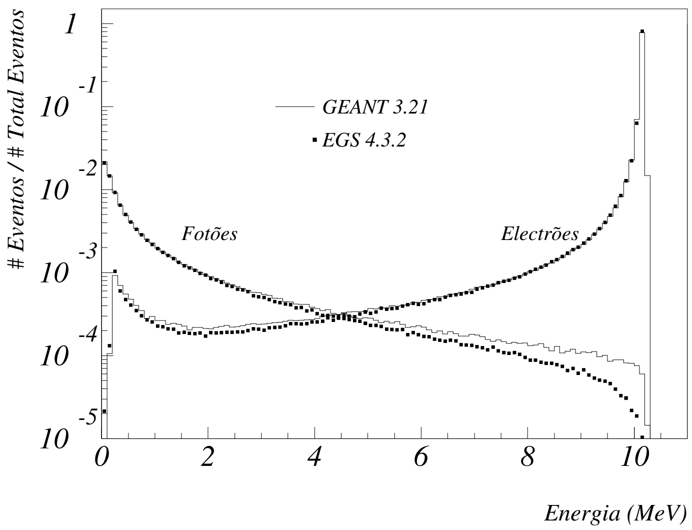


Figura 3.6: Espectros de energia de electrões e fotões no primeiro nível de caracterização para os códigos de simulação EGS4 e GEANT3

médias é estatisticamente significativa, encontrando-se a mais de 5 desvios padrão do erro estatístico associado à energia média de cada espectro. Esta discrepância relaciona-se com as diferentes modelações dos processos físicos nos dois códigos de simulação, mais concretamente com a perda restrita de energia por colisão e produção discreta de *bremsstrahlung*.

Nos programas de simulação Monte Carlo tipo–II – Capítulo 2 – a contabilização da perda restrita de energia de electrões por colisão, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta}$, abaixo de 10 keV (`AE` e `DCUTE`), é considerada como um processo contínuo entre interacções catastróficas. As parametrizações que descrevem a perda de energia por colisão abaixo de 10 keV para o EGS4 [Nelson et al., 1985] e GEANT3 [Gianni et al., 1994] são comparadas na figura 3.7.

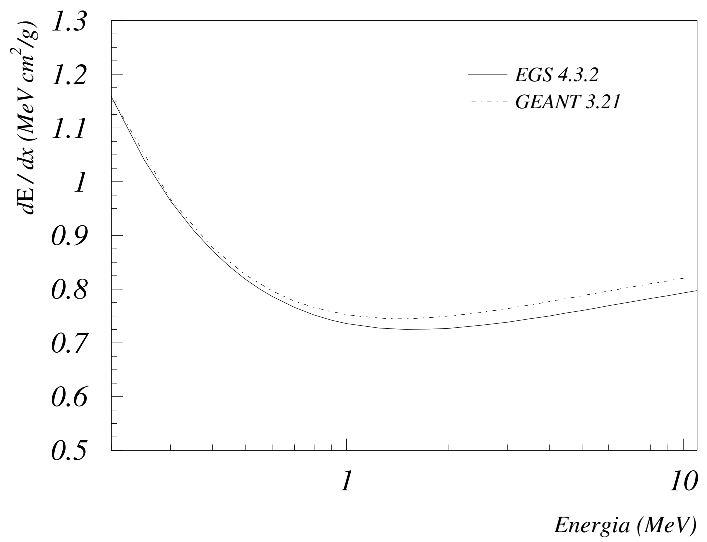


Figura 3.7: Parametrizações para a perda restrita de energia por colisão no ouro dos códigos EGS4 e GEANT3

Verificam-se diferenças nos valores de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{col,\Delta}$ da ordem dos 2% para energias superiores a 1 MeV. A perda de energia por colisão para transferências de energia abaixo dos 10 keV para o GEANT3 encontra-se sobrestimada em relação à do EGS4, o que conduz ao aumento do número de electrões de baixas energias, observado nos espectros de electrões no intervalo de energias entre 1 e 4 MeV aproximadamente. No espectro de fotões, verifica-se um desacordo entre os resultados das simulações na região do limiar da energia (*end point*). As energias médias calculadas com EGS4 e GEANT3 são respectivamente 1.1910 $\pm$

0.0020 MeV e 1.3440 ± 0.0017 keV, diferindo de aproximadamente 150 keV. A comparação das secções eficazes de *bremsstrahlung* diferenciais no momento do fotão, $\frac{d\sigma}{dk}$, entre os dois códigos de simulação, permite explicar as diferenças encontradas nos espectros de fotões e complementar a análise das diferenças encontradas nos espectros de electrões. No código EGS4, abaixo de 50 MeV, a secção eficaz diferencial é determinada pela primeira aproximação de Born à equação de Bethe-Heitler para a secção eficaz de *bremsstrahlung* com correcções empíricas do *ICRU 37 Report* [ICRU, 1984, Rogers et al., 1989]. A parametrização utilizada no código GEANT3 recorre a resultados experimentais obtidos por Seltzer e Berger [Seltzer and Berger, 1985] e para energias de electrão incidente, T, superiores a 1 MeV, é baseada na equação de Bethe-Heitler corrigida com factores de Coulomb. No limite de elevadas frequências (quando k $\rightarrow$ T) a parametrização afasta-se da equação de Bethe-Heitler, devido à introdução de correções adicionais. Estas permitem melhorar o acordo entre os espectros de *bremsstrahlung* simulados e experimentais para energias de electrões incidentes superiores a 40–50 MeV. As secções eficazes diferenciais para o ouro e para electrões com energia incidente de 10 MeV, foram extraidas dos geradores de *bremsstrahlung* dos códigos – Figura 3.8.

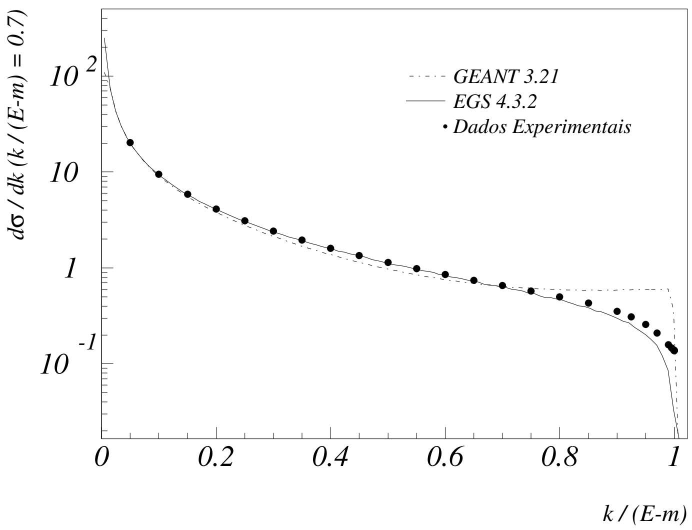


Figura 3.8: Secções eficazes de *bremsstrahlung* diferenciais no momento do fotão para electrões de 10 MeV no ouro geradas com EGS4 e GEANT3. Dados experimentais extraídos de NIST [Seltzer and Berger, 1985]

As secções eficazes encontradas são bastante semelhantes e apresentam um bom acordo com os dados experimentais compilados por Seltzer e Berger para momentos dos fotões entre 0 e 7 MeV [Seltzer and Berger, 1985]. Na região do limiar da energia observa-se um afastamento da secção eficaz gerada pelo código GEANT3 relativamente aos dados experimentais e à secção eficaz gerada pelo EGS4. Tal comportamento deve-se à correção para o limite de elevadas frequências incluída no código GEANT3, que compromete o acordo com os dados experimentais na gama de energias utilizada nas simulações de aceleradores lineares clínicos. Estas diferenças são consistentes com as encontradas entre os espectros de fotões. O aumento da probabilidade de emissão de fotões de elevado momento ($0.7 < \frac{k}{(E-m)} < 1$) associado a uma maior perda de energia radiativa tem como consequência o aparecimento de um maior número de electrões de baixas energias. O desacordo observado nos espectros de electrões calculados com EGS4 e GEANT3 resulta de duas contribuições distintas: diferenças entre as perdas de energia restrita por colisão e diferentes parametrizações da secção eficaz diferencial de *bremsstrahlung*. O processo de dispersão discreta de Møller e perda restrita de energia por processos radiativos não foram considerados neste estudo, porque o modelo teórico para a dispersão discreta de Møller, incluído nos dois códigos de simulação, é igual, e as perdas restritas de energia radiativa correspondem a apenas 10% da perda de energis total restrita.

Na caracterização do feixe de electrões são também analisadas as fluências de electrões e de fotões – Figura 3.9. Estas permitem avaliar a evolução da secção transversal do feixe nas várias fases de modelação ao longo do acelerador. Para a histogramação das fluências considerou-se o número de electrões ou fotões presentes em aneis centrados no eixo de radiação de raios sucessivamente maiores, dividido pela área do respectivo anel. A contaminação do feixe de electrões por fotões de *bremsstrahlung*, neste nível de caracterização, pode ser avaliada pela fluência de fotões. Esta revela uma maior produção de *bremsstrahlung* na região central do feixe, sendo desprezável para raios superiores a 0.2 cm.

A fluência de electrões apresenta uma distribuição aproximadamente gaussiana com uma meia largura a meia altura de 0.18 cm ($\sigma = 0.15$ cm). A dispersão angular

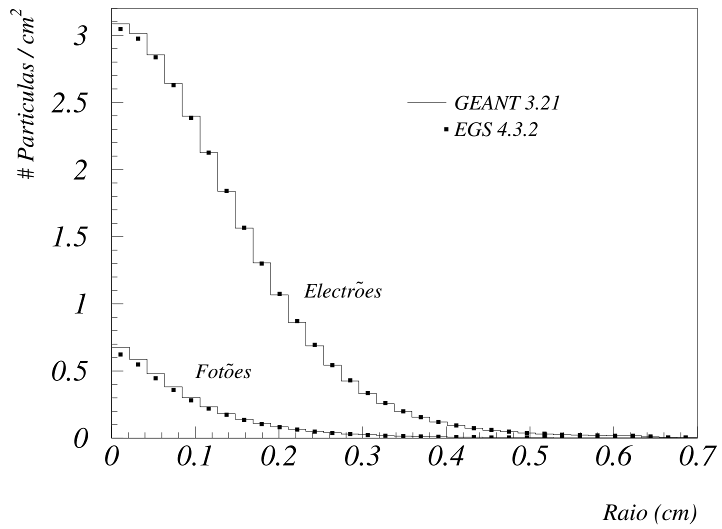


Figura 3.9: Fluências de electrões e fotões no primeiro nível de caracterização

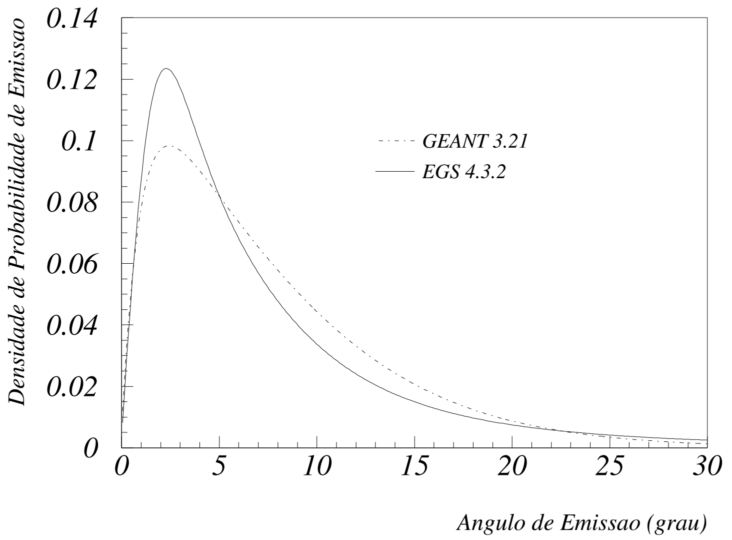


Figura 3.10: Distribuições angulares de emissão do fotões de 1 MeV no ouro por electrões de 10 MeV geradas por EGS4 e GEANT3

no ouro pode ser calculada em primeira ordem por:

$$\theta_0 = \frac{13.6\ MeV}{\beta cp} z \sqrt{(\frac{x}{X_0}} \left[1 + 0.038 \ln\left(\frac{x}{X_0}\right)\right] \tag{3.2}$$

onde θ_0 é o ângulo médio da dispersão no material, p, βc e z são respectivamente o momento, velocidade e carga eléctrica da partícula incidente, $\frac{x}{X_0}$ é a espessura do meio dispersor em unidades de comprimento de radiação [Groom and *et al*, 2000]. O valor de θ_0 encontrado é de 4.24 graus correspondendo a um desvio do eixo central ao fim de 1 cm de ar (distância entre o final da folha de ouro e o plano de contabilização) de 0.16 cm. Este valor está em acordo com os resultados da simulação para a fluência de electrões.

Motivado pelas diferenças encontradas nas secções eficazes de *bremsstrahlung* diferenciais no momento do fotão, foi efectuada a comparação da secção eficaz diferencial no momento do fotão e ângulo de emissão, $\frac{d\sigma}{d(k,\theta)}$, entre o EGS4 e o GEANT3. A parametrização implementada no EGS4 [Bielajew et al., 1989] para a amostragem do ângulo de emissão relativamente à direcção de incidência do electrão é baseada na equação 2BS do artigo de Koch e Motz [Koch and Motz, 1959]. Esta equação relativista resulta da primeira aproximação de Born para pequenos ângulos, incluindo um factor de correcção baseado no potencial Thomas-Fermi. A parametrização usada no código GEANT3 é uma aproximação à secção eficaz diferencial em ângulo e momento de Y. S. Tsai [Tsai, 1974]. Esta formula simplificada apresenta uma probabilidade de emissão isotrópica no limite de baixas energias ($T < 100$ keV e $k < 10$ keV). As distribuições angulares de emissão de fotões de 1 MeV no ouro por electrões de 10 MeV foram simuladas ao nível dos geradores do EGS4 e GEANT3 – Figura 3.10. Observa-se uma menor probabilidade de emissão de fotões com pequenos ângulos com GEANT3 relativamente ao EGS4. No entanto estas diferenças não são observáveis nas fluências de fotões.

3.3.2 Folhas Dispersoras Secundárias

O segundo nível de caracterização encontra-se localizado abaixo da estrutura de suporte das folhas de dispersão secundárias a uma distância de 10.83 cm da fonte de electrões. O esquema das folhas de dispersão secundárias é apresentado na figura 3.11, com a indicação dos raios das folhas de alumínio e da parede de suporte.

Figura 3.11: Esquema da estrutura das folhas de dispersão secundárias

Os espectros de electrões ao fim da estrutura dispersora secundária – Figura 3.12 – são caracterizados pela presença de dois máximos de energia de 10.1250 ± 0.0004 MeV e 9.2500 ± 0.0028 MeV. A origem do segundo máximo deve-se à interacção do feixe de electrões com a parede de suporte das folhas de dispersão secundárias. Durante o percurso entre a folha de dispersão primária e o final das folhas de dispersão secundárias (10 cm) a secção transversal do feixe de electrões aumenta devido à dispersão dos electrões no ar. O feixe de electrões, ao fim desta distância, apresenta um raio máximo de aproximadamente 3 cm superior ao raio interno (2.2 cm) da parede de suporte das folhas de dispersão secundárias.

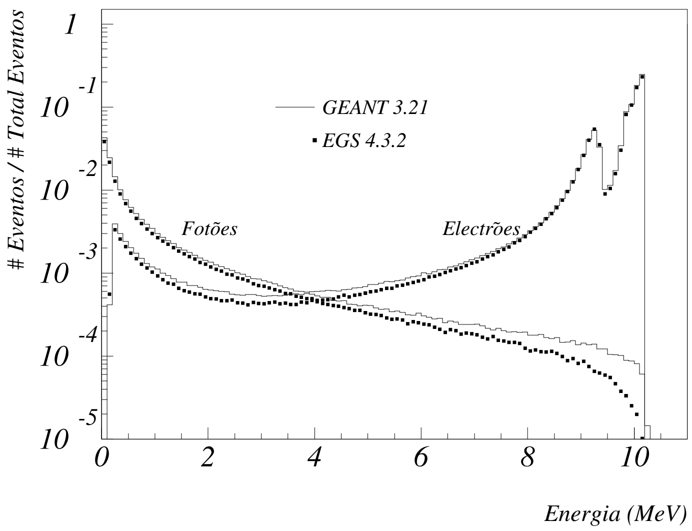


Figura 3.12: Espectros de energia de electrões e fotões no final das folhas de dispersão secundárias

Desta forma uma pequena percentagem (< 10%) de electrões da região periférica do feixe, incide lateralmente no final da parede de suporte penetrando cerca de 0.5 mm de material. Este valor foi estimado a partir da perda de energia no alumínio de electrões com 9–10 MeV ($\frac{dE}{dx} \approx 15.01$ MeV cm^{-1}), assumindo uma perda média de energia, dE, de 875.0 keV correpondente à diferença entre os dois picos no espectro de electrões. Ao atravessarem a parede de alumínio, os electrões perdem mais energia relativamente aos electrões da região central do feixe. A origem do segundo máximo no espectro de electrões foi estudada com maior detalhe com o código EGS4. No mesmo nível de caracterização foi definido um novo histograma com condições de corte em raio pré-definidas. Neste histograma foi apenas contabilizada a energia de electrões que apresentassem uma distância ao eixo central superior a 2.2 cm, tendo interagido previamente com a parede de suporte. O espectro de electrões resultante foi comparado com o espectro de electrões obtido sem corte geométrico – Figura 3.13.

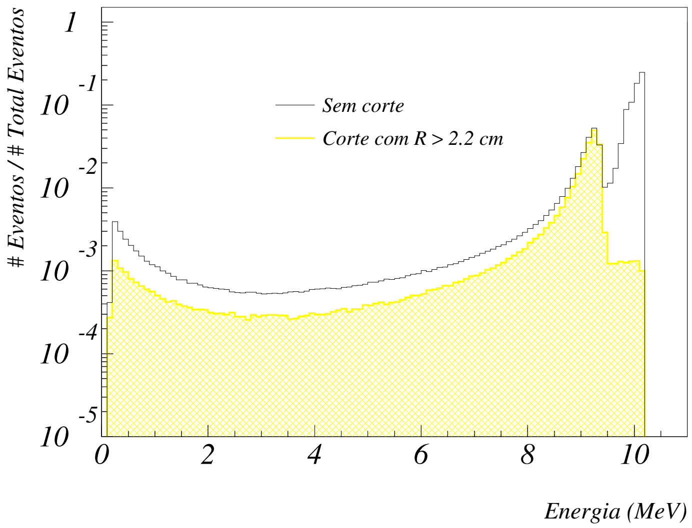


Figura 3.13: Espectro de energia de electrões sem e com condição de corte em raio ($R > 2.2$ cm)

Verifica-se que o espectro obtido com a condição de corte, tem um máximo para a energia de 9.2530 MeV coincidente com o segundo máximo do espectro em energia do feixe de electrões, apresentando uma energia média de 8.3360 ± 0.0028 MeV. A contabilização da energia depositada na parede de suporte efectuada com EGS4 – Figura 3.14 – indica que a deposição mais provável de energia é de 868.8 keV. Este valor é consistente com a diferença média de energias de 875.0 keV entre os dois máximos do espectro de electrões. A distribuição apresenta a forma de uma curva de Landau, o que suporta a hipótese dos electrões interagirem com uma fina camada de material da parede de suporte [Leo, 1986].

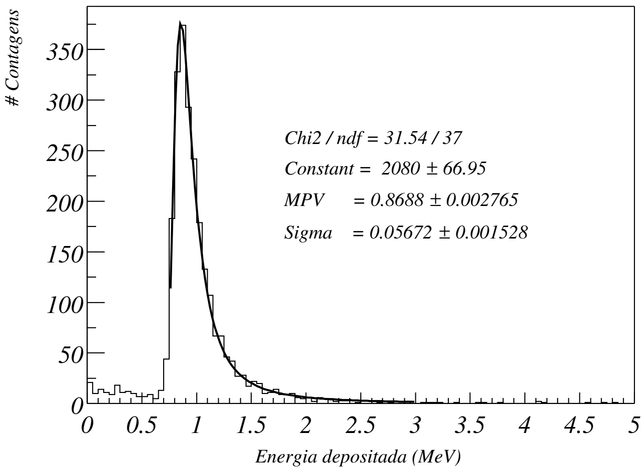


Figura 3.14: Energia depositada no suporte de alumínio das folhas de dispersão secundárias. Valor mais provável MPV = 868 keV

Este efeito geométrico representa um detalhe interessante da interacção do feixe com as componentes do acelerador que, pela não existência de dados experimentais, só pode ser observado e analisado por simulação. A existência de um segundo máximo no feixe de electrões foi descrito por outros autores para diferentes aceleradores lineares [Deasy et al., 1996]. As energias médias dos espectros de electrões encontradas para o EGS4 e para o GEANT3 são respectivamente 9.3460 ± 0.0005 MeV e 9.3090 ± 0.0005 MeV. A diferença de 37.0 keV, estatisticamente significativa, deve-se ao excesso de electrões de baixa energia observado nos resultados do código GEANT3. As energias médias de fotões são 1.1030 ± 0.0013 MeV para o EGS4 e 1.1970 ± 0.0013 MeV para o GEANT3. Os espectros de fotões apresentam diferenças na região do limiar de energia consistentes com as encontradas nos espectros de fotões da folha de dispersão primária.

A geometria em "escada" das folhas de dispersão secundárias permite a absorção e dispersão diferencial do feixe necessária para o aumento da sua secção transversal. Os electrões da região central atravessam uma espessura extra de material relativamente à região periférica. Como consequência perdem mais energia e são preferencialmente dispersos para as regiões laterais, estabelecendo-se um balanço entre o número de electrões no centro e na periferia do feixe. Desta forma resulta a formação de um campo de radiação uniforme após a passagem pelas folhas de dispersão secundárias. Os restantes elementos do acelerador, nomeadamente os colimadores secundários e aplicador, controlam as dimensões do campo por remoção de electrões com elevados ângulos polares, sem alterarem a uniformidade deste, que fica definida após as folhas secundárias. O efeito da geometria das folhas dispersoras secundárias pode ser observado nas fluências de electrões e de fotões neste nível de caracterização – Figura 3.15.

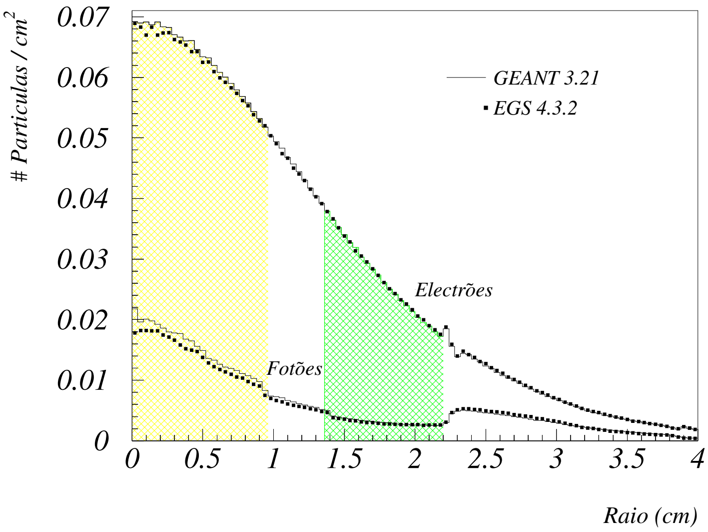


Figura 3.15: Fluência de electrões e fotões no final das folhas de dispersão secundárias obtidas com os códigos EGS4 e GEANT3

Observa-se uma diminuição do número de fotões por área em função do raio entre 0 e 2.2 cm. A 0.4 cm, 0.9 cm e 1.4 cm verificam-se descontinuidades, coincidentes com os raios das folhas de alumínio. Este comportamente corresponde a uma menor produção de fotões de *bremsstrahlung* devido à passagem dos electrões por camadas de alumínio sucessivamentes menos espessas. Para o raio de 2.2 cm, ocorre um aumento do número de fotões e electrões. O aumento do número de fotões deve-se à maior produção de radiação de travagem devido à interacção dos electrões com a parede de suporte das folhas. O aumento do número de electrões encontra-se restricto a uma região de raio 2.2–2.4 cm (ponto de impacto dos electrões com o suporte) e deve-se à perda de energia dos electrões do feixe primário através da produção suplementar de raios-δ secundários. Este processo está na origem do segundo máximo de energia analisado anteriormente. O aumento da secção transversal do feixe torna-se visivel ao comparar a fluência de electrões da folha dispersora primária com a fluência obtida após as folhas secundárias.

As fluências de electrões obtidas com os códigos EGS4 e GEANT3 apresentam um bom acordo. Nas fluências de fotões são detectadas diferenças na ordem dos 10% para raios inferiores a 1.0 cm. Este resultado está de acordo com estudos comparativos entre o código EGS4 e medições experimentais realizados por Faddegon e Rogers [Faddegon and Rogers, 1993], que indicam um nível de precisão no cálculo de fluências com EGS4 de aproximadamente 10%.

3.3.3 Câmara de Dose

O feixe de electrões após a passagem pelas folhas de dispersão secundárias atravessa a câmara de ionização – Figura 3.16. Esta estrutura tem como função a monotorização da intensidade do feixe não actuando de forma directa na sua modelação. No entanto a sua presença induz o aparecimento de efeitos geométricos interessantes de analisar por simulação.

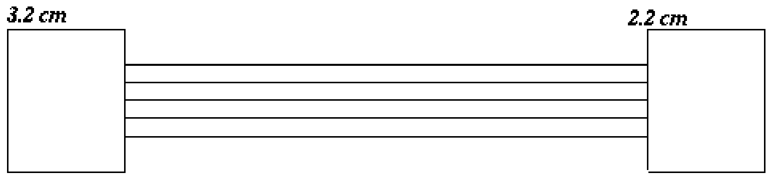


Figura 3.16: Esquema da câmara de ionização do acelerador Siemens KD2

O nível de caracterização encontra-se a uma distância de 10 cm do final da câmara de dose e a 22 cm da fonte pontual de electrões. Os espectros de electrões e fotões foram extraidos dos espaços de fases dos códigos EGS4 e GEANT3 – Figura 3.17. Observam-se dois máximos no espectro de electrões de energias 10.0340 ± 0.0006 MeV e 9.2530 ± 0.0006 MeV. Por comparação com o espectro de electrões obtido do segundo nível de caracterização, verifica-se a existência de uma menor diferença entre os dois máximos de energia. Tal deve-se à maior dispersão em energia do máximo principal que no final das folhas secundárias apresenta uma energia de 10.1250 MeV deslocando-se para 10.0340 MeV. As energias médias calculadas com os códigos EGS4 e GEANT3 são 9.1370 $\pm$ 0.0006 MeV e 9.1330 $\pm$ 0.0006 MeV respectivamente. Os espectros de electrões apresentam um bom acordo. A diferença de 4.0 keV é menor que as encontradas nos outros níveis de caracterização embora estatisticamente significativa. Os espectros de fotões, com energias médias 1.1160 $\pm$ 0.0077 MeV para o EGS4 e 1.2090 $\pm$ 0.0083 MeV para o GEANT3, apresentam um desacordo na região do limiar de energia à semelhança dos primeiros níveis de caracterização.

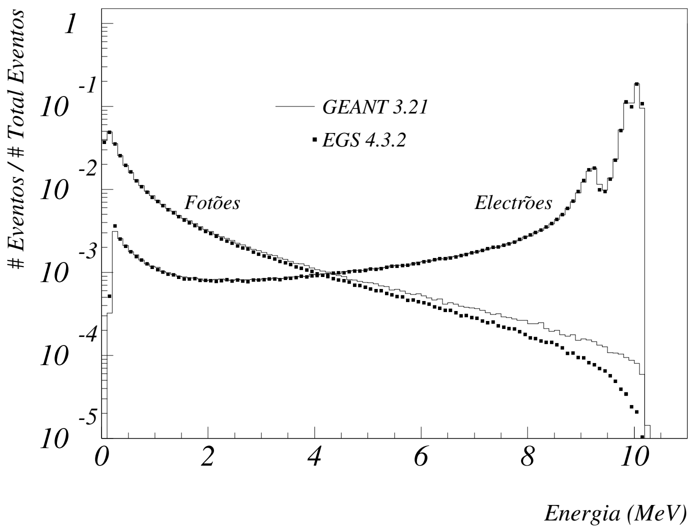


Figura 3.17: Espectros de energia de electrões e fotões no terceiro nível de caracterização

Neste nível de caracterização a análise das fluências de electrões e de fotões – Figura 3.18 – é complementada com o estudo da distribuição da energia média em função do raio, calculada a partir das variáveis guardadas nos espaços de fases obtidos para cada código de simulação. Na fluência de electrões observa-se uma região uniforme de 0 cm a 5.0 cm, como consequência da interacção do feixe com as folhas secundárias e dispersão dos electrões no ar. Da interacção do feixe com a parede de suporte da câmara de ionização ocorre um aumento da produção de raios-δ. Estes juntamente com electrões de elevados ângulos polares provenientes das estruturas

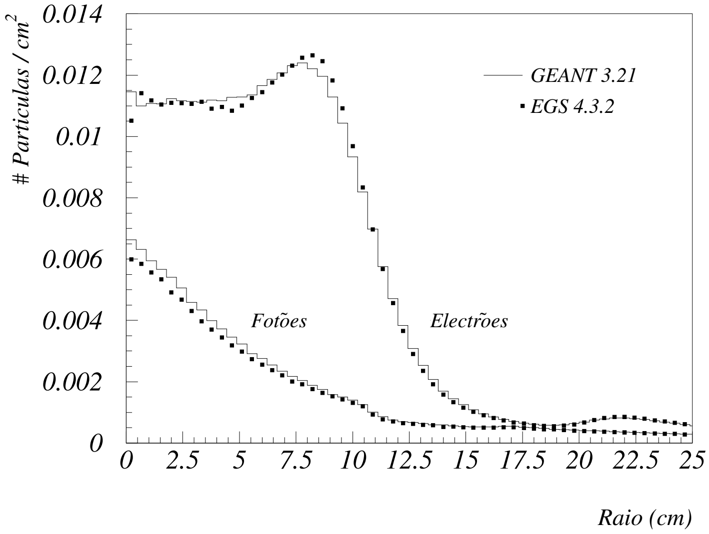


Figura 3.18: Fluências de electrões e fotões ao fim do primeiro módulo de simulação

primária e secundária que atravessam a câmara de ionização pelo lado exterior, contribuem para o aumento do número de electrões para raios superiores a 5.0 cm. A fluência de electrões foi analisada em paralelo com a energia média de electrões em função do raio – Figura 3.19. O aumento da energia média para pequenos raios (r $<$ 3.5 cm) deve-se à geometria das folhas de dispersão secundárias. Os electrões que atravessaram uma maior espessura de alumínio (região central) apresentam uma maior perda de energia, contribuindo para o decréscimo da energia média relativamente à dos electrões das regiões periféricas. Este efeito ainda é observável após a passagem pela câmara de ionização devido à fraca interacção do feixe com as componentes desta estrutura. Entre os raios de 5.0 cm e 7.0 cm a energia média decresce de forma abrupta observando-se um pequeno aumento da fluência de electrões nesta região. Este aumento deve-se à maior produção de raios-δ resultantes da interacção do feixe com a parede de suporte da câmara de ionização, apresentando em média energias mais baixas relativamente aos electrões do feixe primário. Para raios superiores a 7.0 cm a presença de electrões de elevados ângulos dispersos pelas folha primária ou pelas paredes de suporte das estruturas localizadas acima da câmara de ionização, contribui para o aumento da energia média. Estes electrões apresentam em média energias superiores aos raios-δ contribuindo para o aumento da energia. Tal é confirmado pelo aumento do número

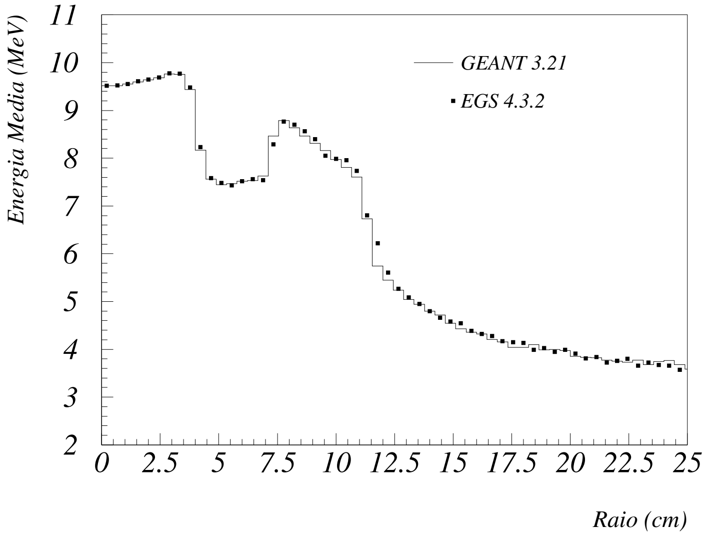


Figura 3.19: Energia média de electrões em função do raio no terceiro nível de caracterização

de electrões na fluência cujo máximo, para o raio de 8.0 cm, coincide com o máximo da energia média. As fluências de electrões e a distribuição da energia média em função do raio apresentam um bom acordo entre o EGS4 e GEANT3, embora para pequenos raios se verifiquem algumas flutuações estatísticas.

Na fluência de fotões o máximo do número de partículas ocorre na região central do feixe. Entre 20 e 25 cm o aumento da fluência deve-se à dispersão dos fotões a elevados ângulos polares pela folha de ouro primária. É interessante notar, que o efeito da geometria em "escada" das folhas de dispersão secundárias presente na energia média de electrões também se verifica na energia média de fotões em função do raio – Figura 3.20. Na região central ($r < 3.5$ cm) a energia média de fotões decresce com o raio, apresentando um comportamento inverso da energia média de electrões. Entre 3.0 cm e 5.5 cm a energia média aumenta de 1.270 MeV para 1.520 MeV. Tal deve-se à interacção dos fotões com a parede de suporte da câmara de ionização em aço, com uma espessura de 1.2 cm. O aumento de 200.0 keV é consistente com resultados obtidos para simulações de interacção de feixes de fotões na ordem do MeV com filtros de aço de espessura semelhante [Chaves et al., 2001]. O feixe resultante é caracterizado por uma maior população de fotões de energias

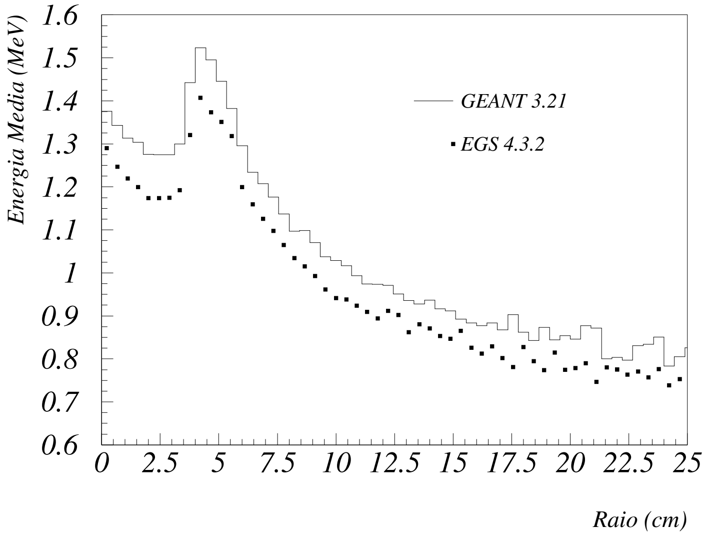


Figura 3.20: Energia média de fotões em função do raio no final do primeiro módulo obtidas com EGS4 e GEANT3

mais elevadas, visível no espectro de fotões, onde se verifica que o máximo do espectro se deslocou cerca de 90 keV para energias mais elevadas.

As fluências de fotões apresentam um bom acordo com excepção da região de pequenos raios. Este comportamento é semelhante ao encontrado na fluência do feixe de fotões ao nível das folhas de dispersão secundárias. Nas energias médias de fotões em função do raio para o EGS4 e o GEANT3, verifica-se uma diferença sistemática de 100 keV que deriva do desacordo encontrado entre as secções eficazes diferenciais no momento do fotão entre os dois códigos.

3.3.4 Colimadores Secundários e Aplicador

O último nível de caracterização do feixe de electrões está localizado a 100 cm da fonte primária. Este nível também designado por plano de tratamento encontra-se no final do aplicador externo. O transporte do espaço de fases que descreve o feixe de electrões após a câmara de ionização é efectuado através dos colimadores secundários e aplicador – Figura 3.21. Estas componentes permitem a definição do campo de radiação e a colimação do feixe de electrões até ao plano de trata-

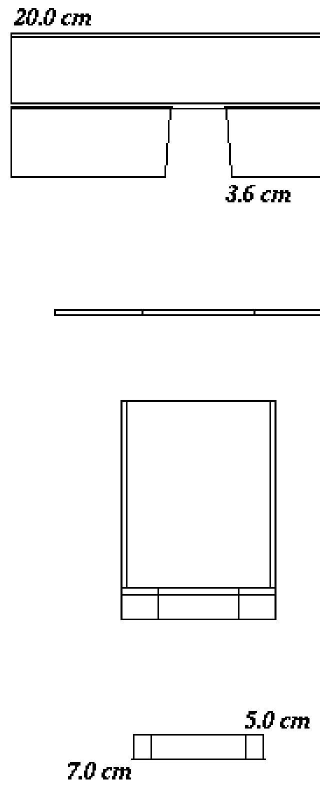


Figura 3.21: Esquema dos colimadores secundários e aplicador de electrões externo para um campo de 10×10 cm^2

mento. Para a obtenção de um campo de radiação de $10{\times}10$ cm^2, os colimadores secundários em tungsténio têm uma abertura de 2.2 cm (colimador superior) e 2.9 cm (colimador inferior) que por si formam um campo virtual de $19{\times}19$ cm^2 a 100 cm SSD. As dimensões do campo são controladas pelo aplicador constituído na sua maioria por alumínio. Este sistema de colimação adicional limita a dispersão do feixe no ar colimando o feixe de electrões. Sem a sua utilização, não seria possível obter feixes extensos bem delimitados abaixo dos 15–20 MeV. A partir dos espaços de fases que representam o feixe final produzido pelo acelerador linear Siemens KD2 obtiveram-se espectros de electrões e de fotões – Figura 3.22. No espectro de electrões observa-se um único máximo de energia de 9.7580 ± 0.0020 MeV para o EGS4 e de 9.7350 ± 0.0024 MeV para o GEANT3. A ausência do segundo máximo associado à dispersão do feixe nas paredes das folhas secundárias de dispersão, deve-se à presença dos colimadores secundários. Estes, através de

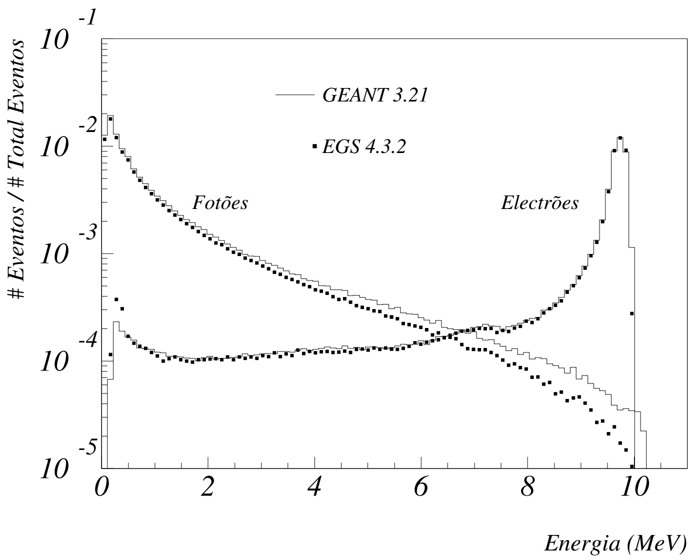


Figura 3.22: Espectros de energia de electrões e fotões no quarto nível de caracterização a 100 cm SSD

um processo de selecção angular, removem os electrões de elevados ângulos polares. A aceitância angular máxima dos colimadores secundários é de 5.43 graus para o campo de 19×19 cm^2. Os electrões da região central do feixe apresentam pequenos ângulos com percursos paralelos ao eixo de radiação, passando por entre os colimadores secundários. Na região periférica do feixe os electrões apresentam ângulos mais elevados que ao interagir com os blocos de tungsténio são removidos do feixe primário. Estas observações podem ser confirmadas na figura 3.23, que apresenta a energia média dos electrões em função do ângulo polar antes dos colimadores secundários obtida com o código GEANT3. O segundo máximo do espectro de electrões é assim caracterizado por elevados ângulos polares ficando na região de rejeição ângular dos colimadores secundários (*sombreado amarelo*). Tal pode ser verificado pela existência de um máximo para elevados ângulos polares (20–25 graus) com uma energia de 9 MeV concordante com a energia de 9.2530 MeV do segundo máximo do espectro no final da câmara de ionização. O feixe de radiação selecionado pelos colimadores secundários corresponde somente à região de baixos ângulos polares caracterizada por uma energia mais elevada.

No espectro de electrões, a existência de um máximo bastante esbatido entre 6.0

MeV e 7.5 MeV deve-se a electrões primários que interagem com as paredes do aplicador perdendo energia mas que, no entanto, chegam ao plano de contabilização [Ding and Rogers, 1995] – Capítulo 4. As energias médias dos espectros de electrões de EGS4 e GEANT3 são de 8.5570 ± 0.0020 MeV e 8.5960 ± 0.0023 MeV respectivamente. No espectro de fotões é ainda possivel observar o fenómeno de auto-absorção nos colimadores secundários e aplicador. Os espectros de fotões apresentam as diferenças típicas dos outros níveis de caracterização. A energia média do espectro de EGS4 é de 1.2490 ± 0.0008 MeV e para o GEANT3 é de 1.3320 ± 0.0011 MeV.

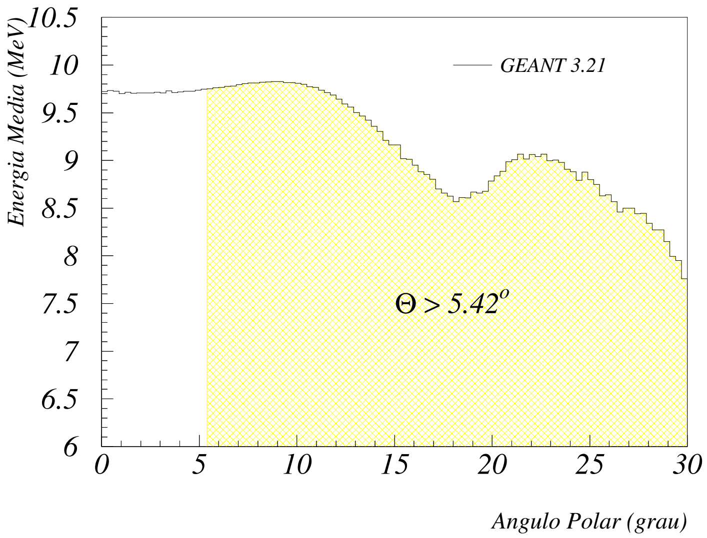


Figura 3.23: Energia média dos electrões do feixe em função do ângulo polar. A sombreado encontra-se a região de rejeição angular para o campo 10×10 cm^2

A fluência de electrões – Figura 3.24 – indica a formação de um campo de radiação uniforme de dimensões $10{\times}10$ cm^2. O campo de radiação é também caracterizado por uma energia média aproximadamente constante, 9.3 MeV, entre 0 cm e 5.0 cm (dimensões de meio–campo) – Figura 3.25. Devido à dispersão do feixe no ar, a assimetria da energia média em função do raio devido à passagem pelas folhas de dispersão secundárias deixa de ser visível (comparar com figura 3.19). Entre 5.0 cm e 7.5 cm a energia média diminui devido à interposição das componentes do aplicador que permitem o ajuste final à superfície de irradiação. A primeira, localizada no final do "corpo" do aplicador, é uma blindagem em aço, com uma

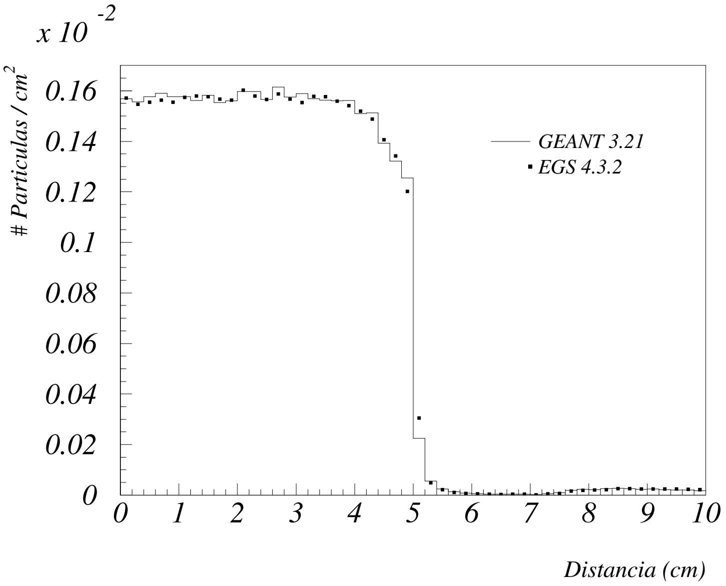


Figura 3.24: Fluência de electrões no quarto nível de caracterização localizado a 100 cm SSD

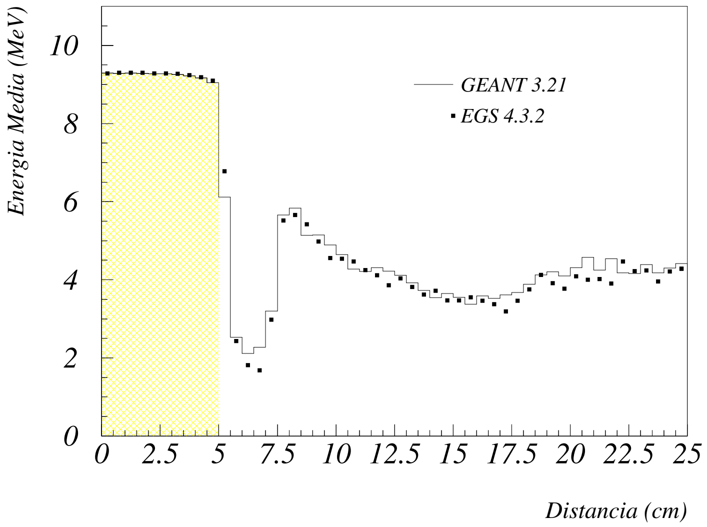


Figura 3.25: Energia média de electrões em função do raio no quarto nível de caracterização calculadas com EGS4 e GEANT3

espessura de 0.6 cm e largura de 3.9 cm. A segunda, é uma blindagem em alumínio, com dimensões de 2.5 cm de espessura e 2.1 cm de largura e encontra-se localizada sobre o plano de tratamento. Os electrões que incidem nestas componente, perdem energia sob a forma de dispersão de Møller e emissão de fotões de *bremsstrahlung*. Os electrões primários ou secundários que emergem, são caracterizados por uma baixa energia média. A baixa transmissão é observada na fluência de electrões, pela diminuição do número de electrões na região entre 5.0 cm e 7.5 cm. Para raios superiores a 7.5 cm, a fluência aumenta novamente, devido às contribuições de electrões dispersos pelo aplicador. Esta distribuição da energia média no plano de tratamento é facilmente visualizada pela análise da fluência *ponderada em energia* – Figura 3.26.

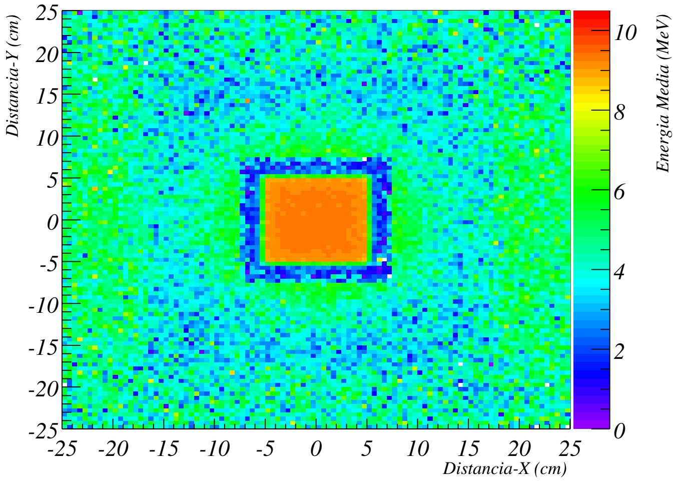


Figura 3.26: Fluência de electrões ponderada em energia ao nível do aplicador a 100 cm SSD

Dentro dos limites do campo 10×10 cm^2, a energia média é constante e máxima. A presença das componentes de blindagem do aplicador traduz-se em energias médias inferiores a 3 MeV. No resto do plano analisado, verifica-se que as energias médias são inferiores a 4–6 MeV. A região de raio superior a 7.5 cm e inferior a 10.0 cm encontra-se populada com electrões dispersos nas paredes do aplicador. O código de simulação EGS4 e GEANT3 descrevem de igual forma o efeito devido às blindagens em aço e alumínio, com um bom acordo entre as fluências e energias médias em função do raio. A fluência de fotões indica um decréscimo do número de partículas desde a região central do feixe até à periféria do campo – Figura 3.27.

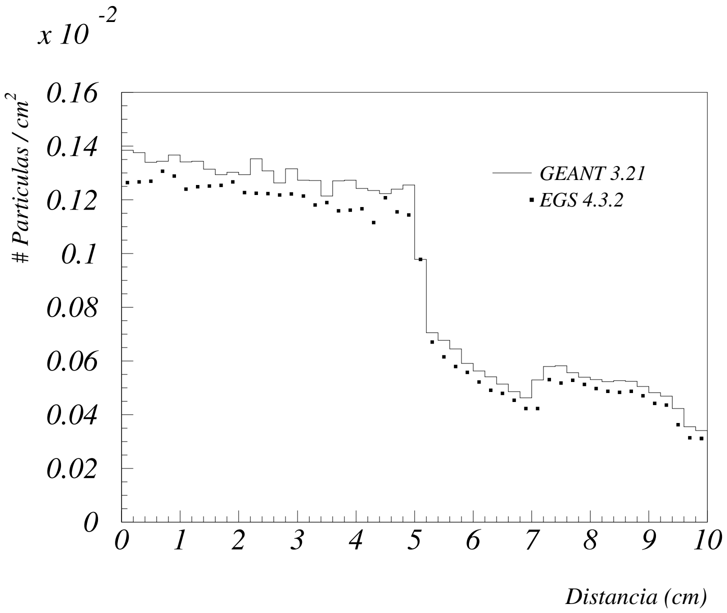


Figura 3.27: Fluência de fotões no quarto nível de caracterização

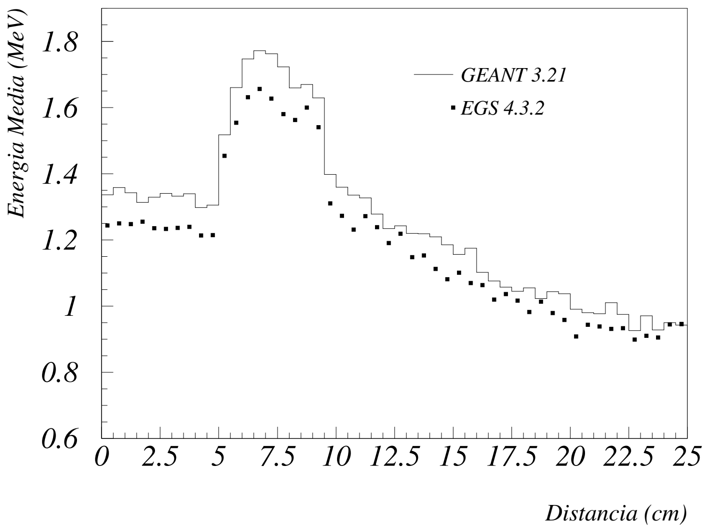


Figura 3.28: Energia média de fotões em função do raio no quarto nível de caracterização

Este efeito já tinha sido observado na fluência de fotões analisada após a câmara de ionização. A diminuição da fluência entre 5.0 cm e 7.5 cm coincide com as dimensões das blindagens do aplicador. A atenuação é elevada devido às quantidades de material interpostas no percurso dos fotões. Neste região, verifica-se o aumento da energia média em cerca de 400 keV – Figura 3.28 – devido a um processo de absorção, semelhante ao que ocorre nas paredes da câmara de ionização. Verificam-se diferenças sistemáticas nas fluências e energias médias em função do raio para fotões entre os resultados dos códigos EGS4 e GEANT3 encontradas também em outros planos de caracterização. As distribuições obtidas a partir dos espaços de fases característicos do feixe de electrões simulados com EGS4 e GEANT3 revelam ao longo do acelerador um bom acordo, em especial na região útil do campo de radiação. A evolução dos valores da energia média do espectro de electrões para os dois códigos de simulação nos diferentes níveis de caracterização do feixe pode ser observada na tabela 3.3.

	EGS 4.3.2	GEANT 3.21
1º nível	9.9290 ± 0.0003 MeV	9.9170 ± 0.0003 MeV
2º nível	9.3460 ± 0.0005 MeV	9.3090 ± 0.0005 MeV
3º nível	9.1370 ± 0.0006 MeV	9.1330 ± 0.0006 MeV
4º nível	8.5570 ± 0.0020 MeV	8.5960 ± 0.0023 MeV

Tabela 3.3: Valores das energias médias dos espectros de energia de electrões nos quatro níveis de caracterização

	EGS 4.3.2	GEANT 3.21
1º nível	1.1910 ± 0.0020 MeV	1.3440 ± 0.0017 MeV
2º nível	1.1030 ± 0.0013 MeV	1.1970 ± 0.0013 MeV
3º nível	1.1160 ± 0.0077 MeV	1.2090 ± 0.0083 MeV
4º nível	1.2490 ± 0.0008 MeV	1.3320 ± 0.0011 MeV

Tabela 3.4: Valores das energias médias dos espectros de energia de fotões contaminantes nos quatro níveis de caracterização

A contaminação de fotões presentes no feixe é descrita de forma distinta para os dois códigos de Monte Carlo, nomeadamente ao nível da energia média e fluências. No entanto, para feixes de electrões com energias de 6–18 MeV, os fotões de contaminação contribuem somente com 0.3–5% da dose depositada, pelo que a importância destas diferenças é marginal [Zhu et al., 2001]. A evolução da energia média dos espectros de fotões para o EGS4 e GEANT3 para os diferentes níveis de caracterização é apresentada na tabela 3.4.

3.4 Validação das Simulações

Toda a informação experimental apresentada neste trabalho foi cedida pelo Instituto Português de Oncologia Francisco Gentil do Centro Regional de Oncologia de Coimbra (IPOFG–CROC), exeptuando a devidamente referenciada.

Os espaços de fase adquiridos com os códigos de Monte Carlo EGS4 e GEANT3 foram validados com dados experimentais obtidos com uma câmara de Markus (PTW–23343), com um volume activo de 0.055 cm^3 num *fantoma* homogéneo de água MP3-PTW [5]. As curvas de dose em profundidade ao longo do eixo central de radiação e perfis transversais a várias profundidades foram simuladas a partir dos espaços de fases gerados para a energia nominal de 10 MeV para o campo de radiação $10{\times}10$ cm^2. A geometria do *fantoma* foi codificada nos dois códigos de simulação como um cubo de água de dimensões $50 \times 50 \times 50$ cm^3. O volume de integração para o cálculo da dose nas curvas de dose em profundidade foi um cilindro colocado ao longo de eixo central com um raio de 1.46 cm e comprimento 1.5 mm. Nos perfis o volume de integração foi um paralelepípedo de dimensões $4.0{\times}0.5{\times}0.5$ cm^3. Os volumes de integração foram escolhidos com dimensões similares ao volume activo da câmara. As curvas de dose em profundidade apresentadas estão normalizadas ao máximo da dose no eixo central do feixe. Os perfis encontram-se normalizados ao valor da dose no eixo central. As curvas de dose em profundidade obtidas para os dois códigos de simulação são apresentadas na figura 3.29.

A comparação com os dados experimentais foi efectuada e as diferenças percentuais entre as curvas de dose calculadas. Diferenças inferiores a 1.5% foram encontradas entre as curvas de dose em profundidade do EGS4 e GEANT3 e os dados experimentais até 4.0 cm de profundidade – Figura 3.30. Tal é considerado o limite de precisão dos códigos de simulação Monte Carlo. Na região entre os 4.0 a 5.0 cm o ajuste aos dados experimentais apresenta diferenças superiores, observando-se uma

[5] PTW, Freiburg, Alemanha

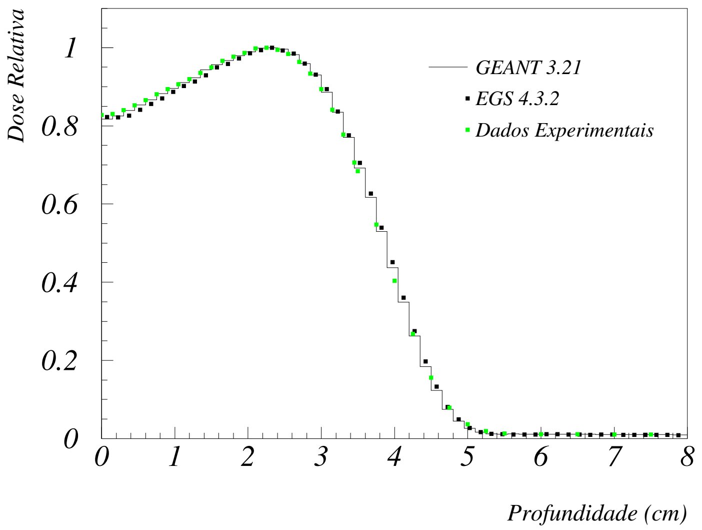


Figura 3.29: Curvas de dose em profundidade, para a energia nominal de 10 MeV ao longo do eixo central, calculadas com EGS4 e GEANT3 e experimental

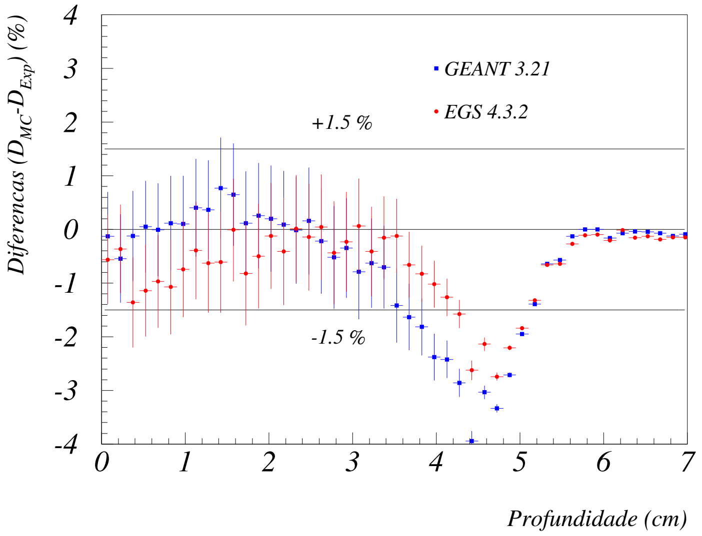


Figura 3.30: Diferenças percentuais em função da profundidade entre os códigos de Monte Carlo e dados experimentais

tendência semelhante para os dois códigos de simulação. Este tipo de comportamento foi encontrado na validação de espaços de fases de feixes de electrões com outros códigos de Monte Carlo (ex: PENELOPE) para a simulação de diferentes aceleradores [Sempau et al., 2001]. No entanto, estas diferenças não comprometem o ajuste das simulações aos dados experimentais na região do alcance efectivo da curva. A possivel correlação entre estas discrepâncias encontradas e a descrição da fonte primária de electrões como uma fonte pontual e monoenergética não foi estudada. No entanto o facto de existir uma dispersão energética gaussiana (σ =14%) no feixe de electrões à saída da estrutura de aceleração poderá justificar este comportamento. A contribuição dos fotões de *bremsstrahlung* para a dose depositada no *fantoma* (profundidade superior a 5.0 cm) para o EGS4 e do GEANT3 está em acordo com os dados experimentais apresentando diferenças máximas de 1.5%.

Para a energia nominal de 10 MeV foram simulados e comparados com medições experimentais perfis transversais de dose às profundidades de 3, 10.5, 21, 31.5, 42 e 48 mm. Na figura 3.31 é apresentado o perfil a 21 mm, próximo da profundidade ao qual ocorre o máximo de deposição de dose.

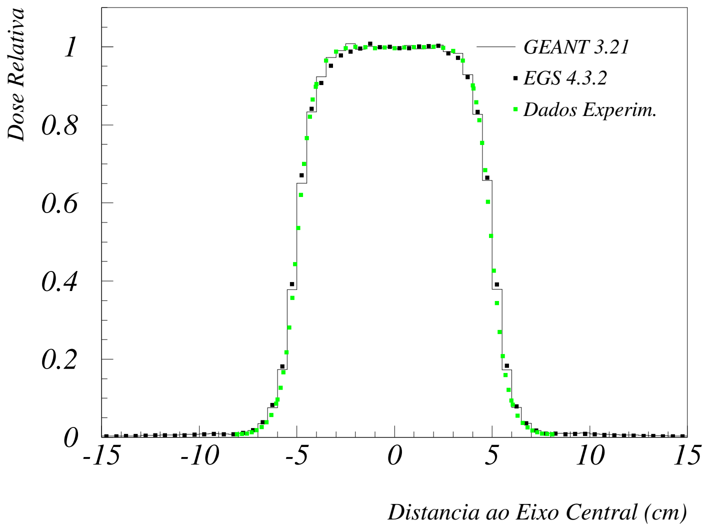
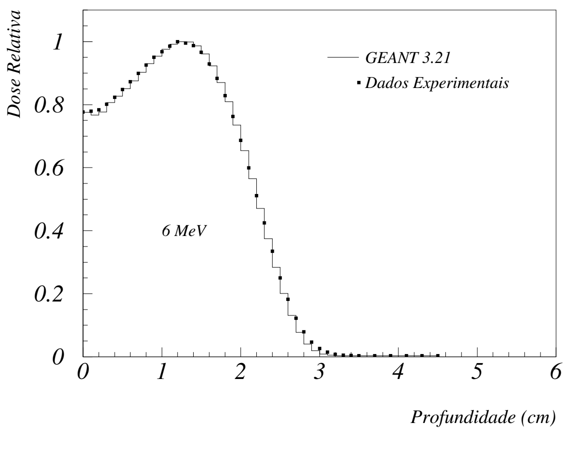


Figura 3.31: Comparação dos perfis de dose a uma profundidade de 21 mm, para a energia nominal de 10 MeV e campo de 10×10 cm^2, calculadas com EGS4 e GEANT3 com dados experimentais

Diferenças laterais inferiores a 2 mm foram encontradas entre cada código de simulação e os dados experimentais. Os perfis transversais simulados para as várias profundidades apresentam um bom acordo na definição do campo geométrico de electrões definido como a largura a meia altura.

Em função destes resultados concluiu-se que os códigos de Monte Carlo EGS4 e GEANT3 são igualmente capazes de produzir espaços de fases com elevada precisão para serem utilizados em aplicações de cálculo de dose. Tendo sido avaliados parâmetros como a velocidade de execução de cálculo, facilidade de implementação de geometria e robustez do sistema de transporte de electrões em geometrias complexas, optou-se por utilizar o código GEANT3 para a geração e validação de espaços de fases para energias nominais de 6, 8, 12, 15 e 18 MeV. Apesar do feixe contaminante de fotões diferir significativamente do calculado com EGS4 na simulação do acelerador, tal não compromete o ajuste aos dados experimentais para energias mais elevadas, como o caso de feixes a 18 MeV. As curvas de dose em profundidade simuladas com os espaços de fases gerados para as novas energias de feixe são apresentadas nas figuras 3.32, 3.33 e 3.34.



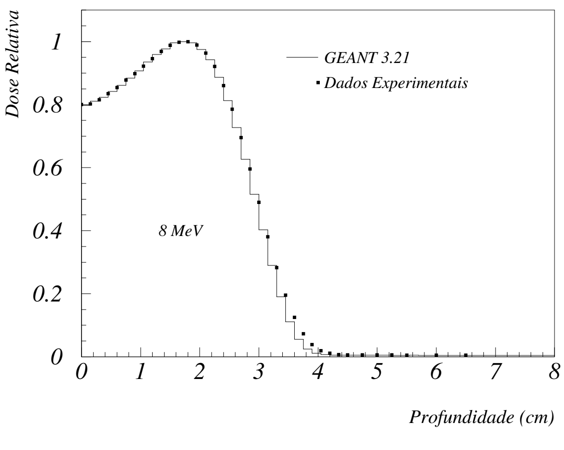


Figura 3.32: Curvas de dose em profundidade simuladas com GEANT3 para o campo 10×10 cm^2 para as energia nominais de 6 MeV (*direita*) e 8 MeV (*esquerda*)

As diferenças relativamente aos dados experimentais são da ordem dos 1.5% para todas as energias. Para as energias de 8 MeV e 15 MeV foram simulados perfis transversais de dose a diferentes profundidades ao longo do eixo central do *fantoma*.

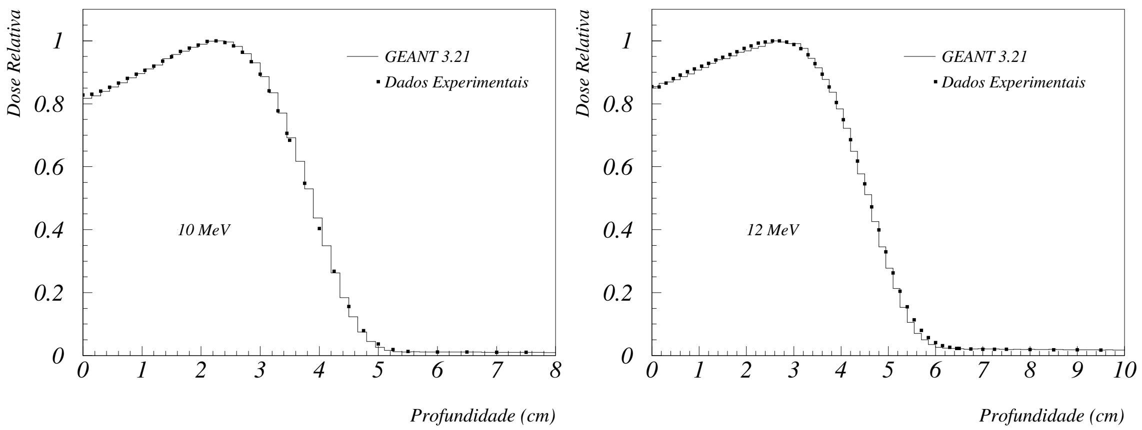


Figura 3.33: Curvas de dose em profundidade simuladas com GEANT3 para o campo 10×10 cm^2 para as energia nominais de 10 MeV (*direita*) e 12 MeV (*esquerda*)

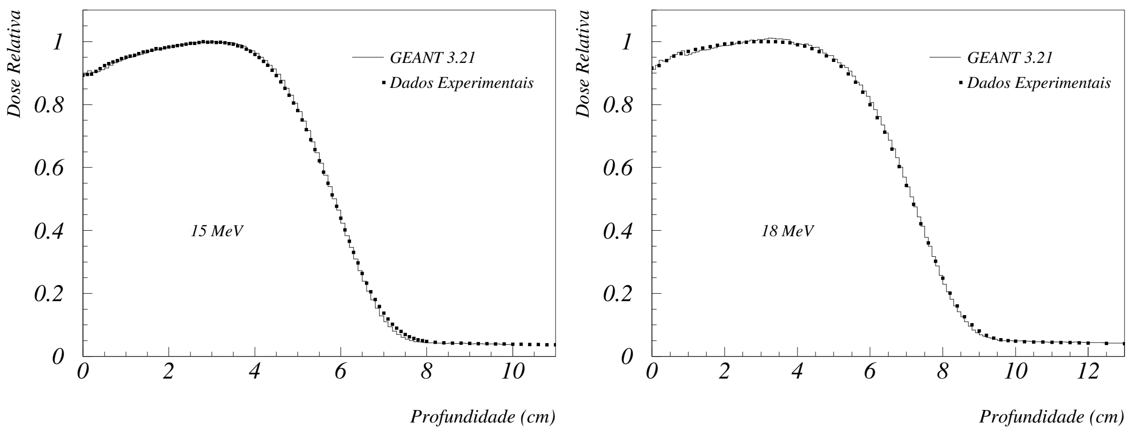


Figura 3.34: Curvas de dose em profundidade simuladas com GEANT3 para o campo 10×10 cm^2 para as energia nominais de 15 MeV (*direita*) e 18 MeV (*esquerda*)

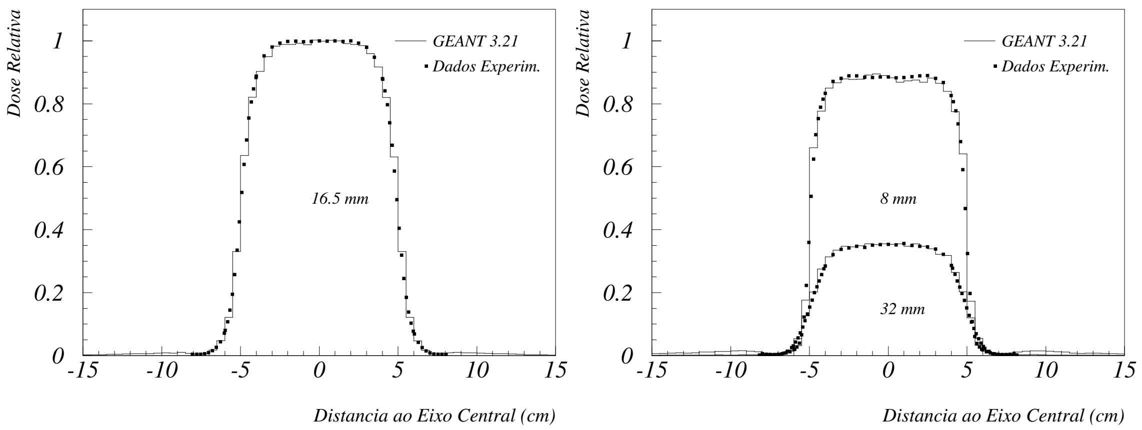


Figura 3.35: Perfis de dose transversais calculados com GEANT3 para o campo 10×10 cm^2 para a energia nominal de 8 MeV à profundidade de 16.5 mm (*direita*), 8 mm e 32 mm (*esquerda*)

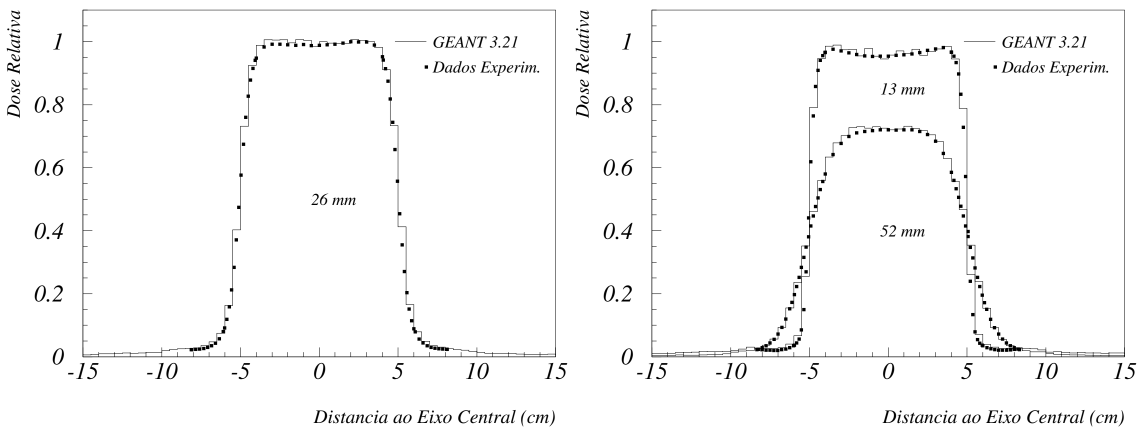


Figura 3.36: Perfis de dose transversais calculados com GEANT3 para o campo 10×10 cm^2 para a energia nominal de 15 MeV à profundidade de 26 mm (*direita*), 13 mm e 52 mm (*esquerda*)

Na figura 3.35 pode-se observar o bom acordo entre os perfis obtidos para a energia de 8 MeV a profundidades de 8, 16.5 e 32 mm e os dados experimentais. Para a energia de 15 MeV, perfis simulados às profundidades de 26, 13 e 52 mm são comparados com dados experimentais na figura 3.36. Estas profundidades foram selecionadas como exemplo, mostrando desta forma um perfil na região de *build-up*, um perfil perto do máximo de dose para cada energia e outro na região de 50% de dose (R_{50}) da curva de dose em profundidade.

Referências

[Bielajew et al., 1989] Bielajew, A. F., Mohan, R., and Chui, C.-S. (1989). Improved bremsstrahlung photon angular sampling in the EGS4 code system. Technical Report PIRS–0203, Institute for National Measurement Standards.

[Bielajew and Rogers, 1987] Bielajew, A. F. and Rogers, D. W. O. (1987). PRESTA: the parameter reduced electron-step transport algorithm for electron Monte Carlo transport. *Nucl. Instrum. Methods B*, 18:165–81.

[Brun, 1994] Brun, R. (1994). *HBOOK – Statistical Analysis and Histogramming.* CERN – European Organization for Nuclear Research. CERN Program Library-Long Writeup Y250.

[Brun et al., 2000] Brun, R., Couet, O., Cremel, N. L., Vandomi, C., and Zanarini, P. (2000). *PAW - Physics Analysis Workstation.* CERN – European Organization for Nuclear Research. CERN Program Library Long Writeup Q121.

[Chaves et al., 2001] Chaves, A., Alves, A., Fragoso, M., Lopes, M. C., Oliveira, C., Peralta, L., Rodrigues, P., Seco, J., and Trindade, A. (2001). EGS4 and MCNP4b MC simulation of a Siemens KD2 accelerator in 6 MV photon mode. Technical Report 01–01, LIP Preprint Note. http://weblib.cern.ch/abstract?EXT-2001-008.

[Deasy et al., 1996] Deasy, J. O., Almond, P. R., and Mc Ellistrem, M. T. (1996). Measuments electron energy and angular distribuitions from clinical accelerators. *Med. Phys.*, 23:675–84.

[Ding and Rogers, 1995] Ding, G. X. and Rogers, D. W. O. (1995). Energy spectra, angular spread and dose distributions of electron beams from various accelerators used in radiotherapy. Technical Report PIRS–0439, Institute for National Measurement Standards.

[Faddegon and Rogers, 1993] Faddegon, B. A. and Rogers, D. W. O. (1993). Comparisons of thick–target bremsstrahlung calculations by EGS/PRESTA and ITS version 2.1. *Nucl. Instrum. Methods B*, 327:556–65.

[Gianni et al., 1994] Gianni, S., Ravndal, S., and Maire, M. (1994). *GEANT – Detector Description and Simulation Tool.* CERN – European Organization for Nuclear Research, October edition. CERN Program Library Long Writeup W5013.

[Groom and *et al*, 2000] Groom, D. E. and *et al* (2000). Review of particle physics. *The European Physical Journal*, C15:1+.

[Hendee, 1999] Hendee, W. R., editor (1999). *Biomedical Uses of Radiation*, volume Part B - Therapeutic Applications, chapter 1–A, Production of high–energy X rays and electrons. Wiley–VCH.

[ICRU, 1984] ICRU (1984). *Stopping Powers for Electrons and Positrons.* ICRU – International Comimission On Radiation Units and Measurements. Report 37.

[Klevenhagen, 1985a] Klevenhagen, S. C. (1985a). *Physics of Electron Beam Therapy*, chapter 1, Accelerators for producing fast electron beams, pages 1–36. Adam Hilher Ltd.

[Klevenhagen, 1985b] Klevenhagen, S. C. (1985b). *Physics of Electron Beam Therapy*, chapter 7, Practical electron dosimetry, pages 173–195. Adam Hilher Ltd.

[Klevenhagen, 1985c] Klevenhagen, S. C. (1985c). *Physics of Electron Beam Therapy*, chapter 3, Basic parameters of electron beams, pages 67–88. Adam Hilher Ltd.

[Koch and Motz, 1959] Koch, H. W. and Motz, J. (1959). Bremsstrahlung cross-section formulas and related data. *Rev. Mod. Phys.*, 31:902–55.

[Leo, 1986] Leo, W. R. (1986). *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, chapter 2, pages 34–50. Springer–Verlag.

[Ma and Jiang, 1999] Ma, C.-M. and Jiang, S. B. (1999). Monte Carlo modelling of electron beams from medical accelerators. *Phys. Med. Biol.*, 44:R157–R189. Topical Review.

[Nelson et al., 1985] Nelson, W. R., Hirayama, H., and Rogers, D. W. O. (1985). *The EGS4 Code System.* SLAC–Stanford Linear Accelerator Center. SLAC–Report–265.

[Rogers, 1984] Rogers, D. W. O. (1984). Low energy electron transport with EGS. *Nucl. Instr. and Meth.*, 227:535–48.

[Rogers et al., 1989] Rogers, D. W. O., Duane, S., Bielajew, A. F., and Nelson, W. R. (1989). Use of ICRU-37/NBS radiative stopping powers in the EGS4 system. Technical Report PIRS-0177, National Research Council of Canada.

[Rogers et al., 1995] Rogers, D. W. O., Faddegon, B. A., Ding, C. X., Ma, C.-M., We, J., and Mackie, T. R. (1995). BEAM: a Monte Carlo to simulate radiotherapy units. *Med. Phys.*, 22:503–24.

[Seltzer and Berger, 1985] Seltzer, S. M. and Berger, M. J. (1985). Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons. *Nucl. Instrum. Methods B*, 12:95–134.

[Sempau et al., 2001] Sempau, J., Sánchez-Reyes, A., Salvat, F., ben Tahar, H. O., Jiang, S. B., and Fernández-Varea, J. M. (2001). Monte Carlo simulation of electron beams from an accelerator head using PENELOPE. *Phys. Med. Biol.*, 46:1163–86.

[Siochi, 2001] Siochi, R. A. C. (2001). Comunicação pessoal.

[Trindade et al., 2001] Trindade, A., Rodrigues, P., Alves, C., Chaves, A., Lopes, M. C., Oliveira, C., and Peralta, L. (2001). Monte Carlo simulation of electron beams for radiotherapy - EGS4, MCNP4b and GEANT3 intercomparison. In Kling, A., Barão, F., Nakagawa, M., Távora, L., and Vaz, P., editors, *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications – Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 23–26 October 2000*, pages 333–9. Springer–Verlag. LIP Preprint Note 01–03, http://weblib.cern.ch/abstract?EXT-2001-009.

[Tsai, 1974] Tsai, Y. S. (1974). Pair production and bremsstrahlung of charged leptons. *Rev. Mod. Phys.*, 46(815).

[Udale-Smith, 1992] Udale-Smith, M. (1992). Monte Carlo calculations of electron beam parameters for three Philips linear accelerators. *Phys. Med. Biol.*, 37(1):85–105.

[Zhu et al., 2001] Zhu, T. C., Das, I. J., and Bjarngard, B. E. (2001). Characteristics of bremsstrahlung in electron beams. *Med. Phys.*, 28:1352–58.

Capítulo 4

Modelo Multi–Fontes para o Acelerador Siemens KD2

A simulação Monte Carlo para o transporte de radiação, tem demonstrado ser um método preciso para o cálculo de dose em Radioterapia, quando comparado com os actuais sistemas de planeamento baseados em algoritmos semi–analíticos. A sua implementação clínica requer informação sobre as características do feixe de radiação produzido pelo acelerador linear para todas as configurações (energia/campo) disponíveis. A abordagem usual consiste na simulação do transporte das partículas através da geometria do acelerador e aquisição de espaços de fases ao nível do plano de tratamento. Apesar de tecnicamente viável existem desvantagens associadas à aplicação deste procedimento. Tal deve-se às especificações técnicas das componentes dos aceleradores nem sempre se encontrarem acessíveis de forma detalhada para codificação da geometria nos códigos de simulação. Frequentemente, pequenas modificações nas dimensões ou composição dos materiais podem induzir discrepâncias significativas nas distribuições de dose calculadas [Ma and Jiang, 1999]. A existência de variações na energia inicial do feixe, mesmo entre aceleradores do mesmo modelo, implica um processo iterativo de ajuste dos parâmetros do feixe de electrões primário por comparação com informação dosimétrica básica, contribuindo de forma significativa para o aumento do tempo total de implementação. A necessidade adicional de um elevado tempo de CPU (dias/configuração) e capacidade de armazenamento de espaços de fases (*Gbyte*/configuração), tornam este processo incompatível com os meios de cálculo disponíveis na generalidade das unidades de Radioterapia. Deste modo uma descrição mais concisa dos feixes de radiação clínicos torna-se necessária para a utilização do método de Monte Carlo como uma alternativa aos sistemas de planeamento actuais.

O modelo multi–fontes foi proposto por C–M Ma [Ma et al., 1997, Ma et al., 1999] como uma nova abordagem para a *representação* de feixes de radiação de electrões e fotões [Fix et al., 2001] e *reconstrução* de espaços de fases. Os parâmetros deste modelo são derivados das simulações efectuadas para uma configuração de referência do acelerador linear em estudo. O ajuste destes parâmetros permite gerar novas configurações do mesmo acelerador ou de outros aceleradores com geometrias desconhecidas, no mesmo modo de tratamento. A *representação* consiste na descrição estatística do espaço de fases de referência através de distribuições caracteristicas. Um processo de amostragem destas distribuições possibilita a *reconstrução/geração* de um espaço de fases dosimetricamente equivalente ao original durante a execução do programa de simulação. Esta metodologia permite a compactação da informação sobre os feixes de radiação em várias ordens de grandeza, eliminando a necessidade de armazenamento em disco de ficheiros espaços de fases, e a redução do tempo de cálculo que fica limitado à simulação das distribuições de dose em *fantomas* ou geometrias complexas reais.

Neste capítulo é descrito o desenvolvimento e validação de um modelo multi–fontes para feixes de electrões produzidos pelo acelerador linear Siemens KD2. A extenção do modelo a várias configurações bem como a outros aceleradores lineares foi estudada e a sua validação efectuada por comparação das distribuições de dose calculadas pelo modelo com dados experimentais.

4.1 O Modelo Multi–Fontes

O conceito de modelo multi–fontes baseia-se na observação que, partículas provenientes de diferentes componentes da geometria do acelerador linear, apresentam distribuições angulares, espaciais e em energia distintas, enquanto que partículas com origem num mesmo componente apresentam características muito semelhantes. Esta propriedade do feixe de radiação permite assumir que as partículas provenientes das várias componentes têm origem em sub–fontes virtuais. Neste contexto, uma sub–fonte representa um objecto com uma geometria e localização bem determinada que simula a emissão de partículas (electrões e/ou fotões).

Na sua forma mais simples, o modelo multi–fontes considera que cada componente corresponde a uma sub–fonte distinta com geometria e localização semelhantes à da respectiva componente de origem. Uma abordagem mais complexa, adoptada neste estudo, consiste no agrupamento de componentes com características de simetria, forma/função e localização semelhantes numa única sub–fonte. As componentes cuja importância dosimétrica não seja considerada relevante são excluídas. As sub-fontes são representadas por pontos, linhas ou planos em substituição da geometria real, permitindo reduzir a dependência do modelo multi–fontes a detalhes das especificações do acelerador linear. A determinação da energia, coordenadas espaciais e cosenos directores de cada partícula simulada é efectuada através de um processo de amostragem de distribuições de energia e fluência. Estas caracterizam as partículas emitidas por cada sub–fonte num plano de contabilização no qual se pretendem reconstruir os espaços de fases.

Devido à possível presença de blocos de colimação adicionais (*cutout*) utilizados em modo de tratamento com electrões, considerou-se o plano de contabilização acima da última componente do aplicador externo. O bloco de colimação adicional bem como a componente do aplicador são simuladas posteriormente com GEANT3, aquando do cálculo das distribuições de dose no *fantoma* homogéno de água. A metodologia seguida para a implementação e validação do modelo multi–fontes é apresentada no diagrama da figura 4.1.

A primeira etapa consiste na simulação de uma configuração de referência do acelerador Siemens KD2 obtendo-se um espaço de fases representativo do feixe no plano pré–definido. A sua validação é efectuada por comparação das distribuições de dose simuladas num *fantoma* homogéneo de água com dados experimentais. A etapa de modelação inclui os processos de *representação* do feixe de radiação e *reconstrução/geração* de espaços de fases para diferentes configurações. A validação dos resultados obtidos com o modelo multi–fontes é efectuada por comparação das distribuições de dose calculadas a partir dos espaços de fases reconstruídos com medições experimentais. As distribuições de energia e fluência obtidas dos espaços de fases reconstruídos e originais podem diferir substancialmente devido às aproximações inerentes ao processo de modelação, pelo que a sua comparação não foi efectuada. O critério de validação é assim de carácter essencialmente dosimétrico tendo em vista a utilização do modelo em aplicações de cálculo de dose.

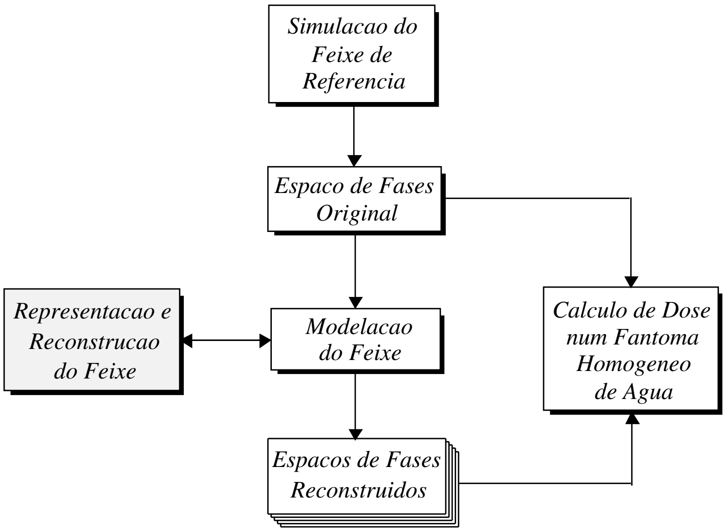


Figura 4.1: Ilustração do procedimento de caracterização e modelação de feixes de radiação usado na implementação do modelo multi–fontes

4.1.1 Representação de Espaços de Fases

O modelo multi–fontes implementado apresenta como configuração de referência o feixe de electrões de energia 10 MeV e campo de radiação 10×10 cm^2. Esta energia corresponde a um valor intermédio na gama de energias de feixe do acelerador Siemens KD2, para um campo utilizado frequentemente na prática clínica. A sua simulação foi efectuada com o código GEANT3, tendo sido adquirido um espaço de fases a uma distância de 97.5 cm da fonte primária de electrões, coincidente com o plano de contabilização acima da última componente do aplicador. A origem de cada partícula que atinge o plano de contabilização foi classificada usando a informação contida na variável `TAG`, através de um esquema de registo codificado na subrotina `GUSTEP`. A variável `TAG` foi declarada com base na variável de utilizador

`UPWGHT`, contida na estrutura `COMMON/GUKINE`. Esta variável acompanha o percurso de qualquer partícula durante o seu transporte, sendo portanto adequada para o registo de qualquer propriedade de interesse para o utilizador. Desta forma, a variável `TAG` regista um número que identifica univocamente o volume de origem, no caso de partículas secundárias, ou o local da última interacção para todas as partículas contidas no espaço de fases de referência – Tabela 4.1.

`TAG`	Componentes / Volumes
2	Folha de Dispersão Primária
3–5	Suporte Folha Disp. Primária
7–10	Folhas de Dispersão Secundárias
11	Suporte Folhas Disp. Secundárias
13	Blindagem Câmara de Ionização
14–23	Folhas *kapton* Câmara de Ionização
25 a 30	Colimadores Secundários
33	Encaixe do Aplicador
35, 37 e 39	"Corpo" do Aplicador

Tabela 4.1: Correspondência entre os valores de `TAG` e as componentes da geometria do acelerador Siemens KD2. Os valores de `TAG` que não se encontram na tabela correspondem a volumes de ar

A origem das partículas carregadas foi considerada como sendo o último volume registado antes de atingir o plano de contabilização (excluindo volumes de ar); para fotões de *bremsstrahlung* a origem foi considerada o local da sua criação ou o último volume onde interagiu por dispersão de Compton ou Rayleigh. O espaço de fases gerado para a configuração de referência fica caracterizado pelas coordenadas espaciais, cosenos directores, energia, carga e a variável `TAG` de cada partícula.

Utilizando a variável `TAG` efectuou-se a análise do espaço de fases para determinar o número de partículas com origem nas diferentes componentes ou regiões da geometria do acelerador – Figuras 4.2 e 4.3. Os resultados obtidos revelaram a presença de um elevado número de electrões cuja última interacção ocorreu na câmara de monitorização, mais concretamente na folha de *kapton* marcada com `TAG`=23. Os restantes electrões encontravam-se distribuidos pelos colimadores secundários ($23 < \texttt{TAG} \leq 30$) e aplicador ($33 \leq \texttt{TAG} \leq 39$), existindo um pequeno número com origem na blindagem de aço da câmara de monitorização (`TAG`=13). Estas observações indicam que a maioria dos electrões presentes no plano de contabilização são electrões

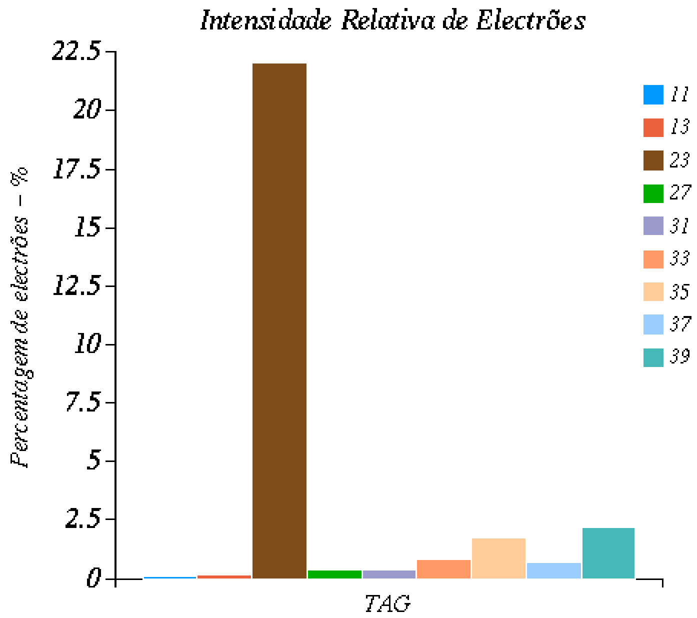


Figura 4.2: Distribuição do número de electrões em função dos valores de `TAG` – Tabela 4.1 – normalizados ao número total de partículas contidas no espaço de fases

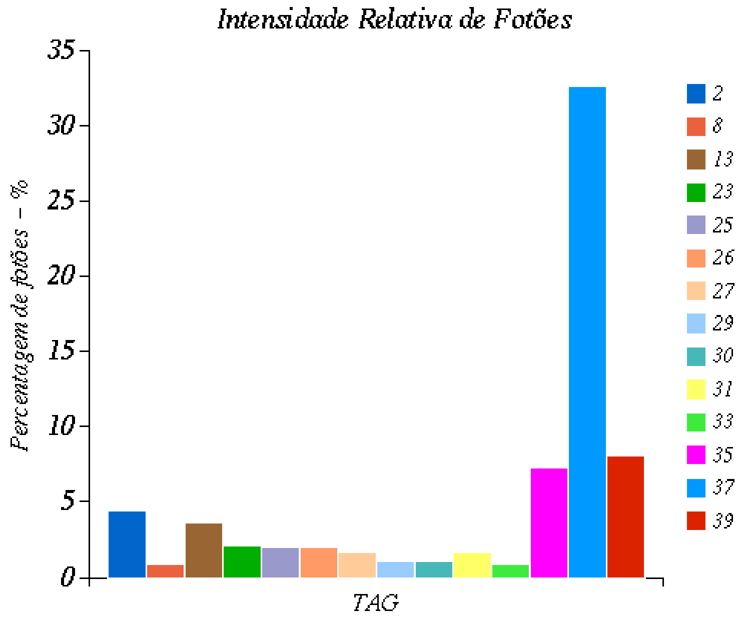


Figura 4.3: Distribuição do número de fotões em função dos valores de `TAG` – Tabela 4.1 – normalizados ao número total de partículas contidas no espaço de fases

directos com origem nas estruturas de modelação/monitorização. Os electrões dispersos surgem essencialmente por interacção com os colimadores secundários e o aplicador. O número máximo de fotões encontra-se atribuido à componente marcada com `TAG`=37, que corresponde à blindagem no final do "corpo" do aplicador. A existência de um número de fotões provenientes de componentes com valores de `TAG` inferiores a 23 indica a presença de fotões directos de *bremsstrahlung* devido à interacção do feixe de electrões com a folha de dispersão primária (`TAG`=2), suporte das folhas de dispersão secundárias (`TAG`=11) e blindagem da câmara de monitorização (`TAG`=13).

A determinação do número de sub–fontes do modelo foi efectuada com base no cálculo das intensidades relativas das várias componentes da geometria. Esta é definida como a razão entre o número de electrões ou fotões e o número total de partículas contidas no espaço de fases normalizada a 100%. A contribuição de positrões para a intensidade relativa das componentes não foi considerada neste modelo. Intensidades relativas inferiores a 0.1% [Ma et al., 1997] foram excluídas da análise tendo-se considerado que tais componentes apresentam uma pequena importância dosimétrica. Os valores das intensidades relativas encontradas indicaram três principais módulos da geometria do acelerador que contribuem de forma significativa para o número de electrões e fotões existente no plano de contabilização: estruturas de modelação, colimadores secundários e aplicador externo. Em cada módulo as componentes foram agrupadas numa única estrutura ou sub–fonte. A intensidade relativa de emissão de electrões e fotões da sub–fonte foi determinada pela soma das respectivas contribuições das componentes agrupadas em cada módulo. Deste modo, o modelo implementado para o acelerador Siemens KD2, apresenta seis sub–fontes (três de electrões e três de fotões). As sub–fontes representativas das estruturas de modelação são responsáveis pela simulação da emissão de electrões e fotões directos, enquanto que as sub–fontes correspondentes aos módulos dos colimadores secundários e aplicador simulam a emissão de electrões e fotões dispersos pelas estruturas de colimação interiores e exteriores da geometria do acelerador.

As caracteristicas de cada sub–fonte foram escolhidas de acordo com a geometria e localização das componentes agrupadas em cada módulo – Figura 4.4. Os electrões directos contidos no espaço de fases (`TAG` $\leq$ 23) são correctamente descritos por

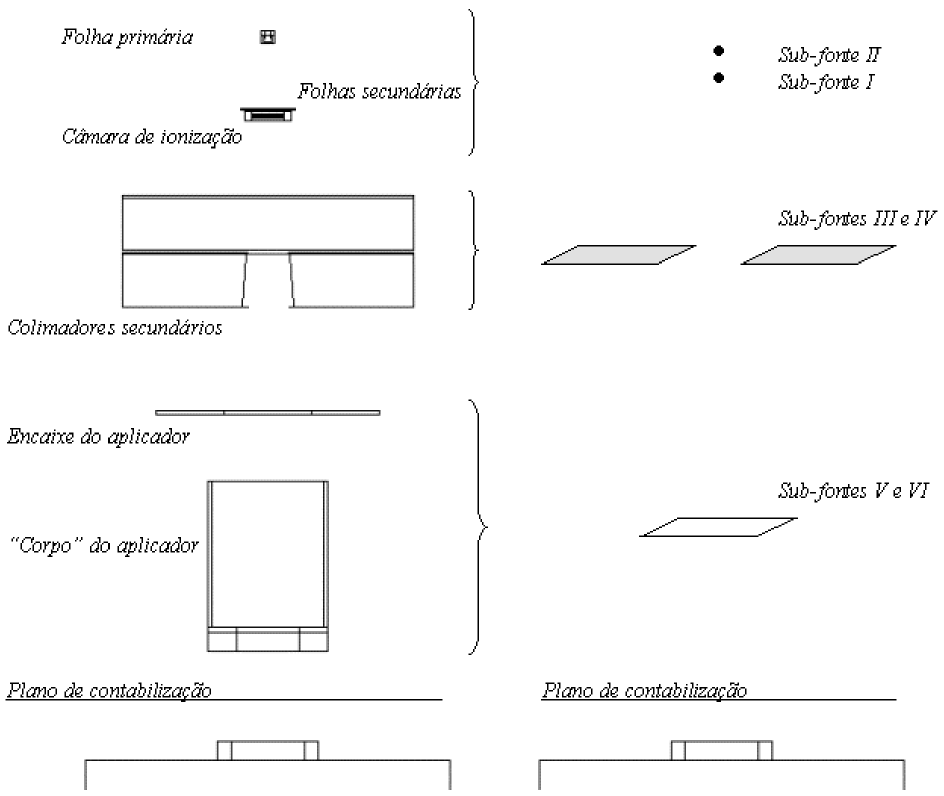


Figura 4.4: Representação da geometria das sub–fontes consideradas no modelo e sua correspondência com a geometria real do acelerador

um feixe de electrões proveniente de uma fonte pontual localizada a um $\mathrm{SSD}_{virtual}$, do plano de contabilização. Tal compensa o efeito do agrupamento das componentes e modelação na dispersão ângular do feixe [Battum and Huizenga, 1999]. Esta aproximação é igualmente adequada para descrever correctamente o feixe de fotões contaminantes com origem nas componentes com `TAG` ≤ 23. Os valores de $\mathrm{SSD}_{virtual}$ utilizados na implementação das sub–fontes pontuais de electrões e fotões (sub–fontes I e II) foram de 87.50 cm e 89.50 cm respectivamente. Estes são valores típicos de aceleradores lineares que apresentam estruturas de dispersão duplas [Jiang et al., 2000]. Para simular a emissão de radiação dispersa pelos colimadores secundários foram consideradas duas sub–fontes extensas. Estas são representadas por dois planos paralelos (sem espessura) dispostos segundo a orientação dos colimadores inferiores. As suas dimensões apresentam as especificações de acordo com a geometria real e estão localizadas a uma distância de 63.28 cm do plano de contabilização (sub–fontes III e IV). A geometria do aplicador do acelerador Siemens KD2 foi modelada por uma sub–fonte do tipo linha de contorno quadrado localizada a 25.63 cm do plano de contabilização coincidente com a cota média do "corpo" do aplicador (sub–fontes V e VI). Na tabela 4.2 estão apresentadas as características gerais das seis sub–fontes implementadas para a modelação do feixe de referência do acelerador Siemens KD2.

Número da sub–fonte	Tipo de sub–fonte	Tipo de partícula	Intensidade relativa %	Distância ao Plano de Contabilização
I	Pontual	Electrões	22.52	87.50 cm
II	Pontual	Fotões	12.07	89.50 cm
III	Planar	Electrões	0.78	63.28 cm
IV	Planar	Fotões	9.53	63.28 cm
V	Linha	Electrões	5.51	25.63 cm
VI	Linha	Fotões	49.59	25.63 cm

Tabela 4.2: Caracteristicas das sub–fontes consideradas no modelo multi–fontes para a energia nominal de 10 MeV e para o campo de radiação 10×10 cm^2

As distribuições de energia e fluência que caracterizam as partículas simuladas por cada sub–fonte foram derivadas do espaço de fases de referência. Para tal foi desenvolvido um programa de análise que permitiu extrair as distribuições do espaço de fases através de condições de corte e posteriormente guardar a informação em histogramas. As condições de corte utilizadas incluiram dois critérios de selecção: a variável `TAG` que permitiu agrupar partículas provenientes das componentes agrupadas em cada módulo; e a variável `Q` (carga) que permitiu distinguir o tipo de partícula emitida por cada sub–fonte. Os espectros de energia de electrões e fotões foram guardados em histogramas unidimensionais com 100 keV de largura de canal – Figura 4.5 e 4.6. A análise do espaço de fases revelou que no interior do campo de radiação os electrões apresentam uma pequena dependência com a energia média em função da distância ao eixo central – Capítulo 3. Um comportamento semelhante foi observado para os electrões fora dos limites que definem o campo de radiação. Esta pequena dependência entre energia e posição permitiu efectuar a selecção da energia de acordo com a localização do electrão dentro ou fora dos limites do campo. As variações da energia média dentro do campo de radiação são inferiores a 10% [Jiang et al., 2000], pelo que neste modelo foi considerado que a energia e posição da partícula são duas variáveis independentes. Para cada sub–fonte foram guardados espectros de energia relativos a electrões no interior e

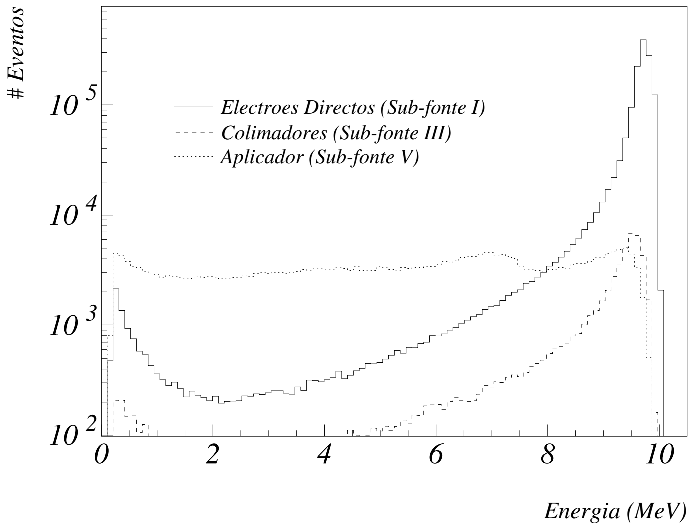


Figura 4.5: Espectros de energia associados às sub–fontes I, III e V que simulam a emissão de electrões

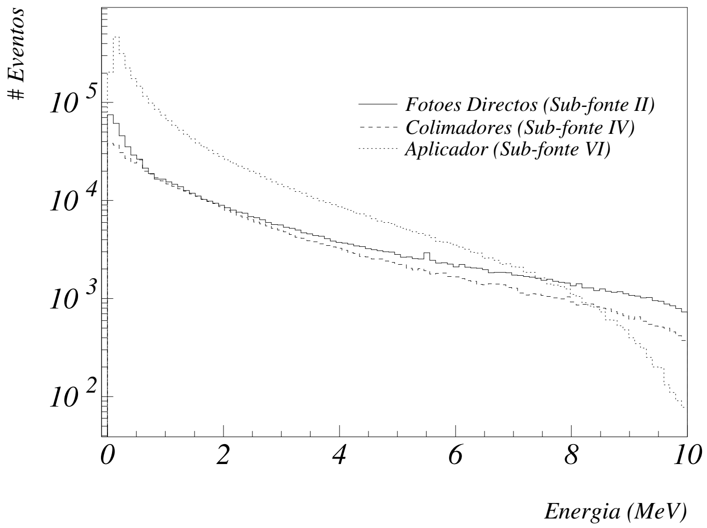


Figura 4.6: Espectros de energia associados às sub–fontes II, IV e VI que simulam a emissão de fotões

exterior do campo de radiação. A mesma abordagem foi utilizada para a componente de fotões contaminantes, embora a energia média em função da distância ao eixo central fora do campo de radiação não seja constante. Esta aproximação é justificada pela pequena contribuição para a dose depositada dos fotões presentes nesta região. As fluências foram armazenadas em histogramas bidimensionais com um canal ou *pixel* de 1×1 mm^2 de área para as seis sub–fontes. A grelha cartesiana que representa a fluência de electrões e fotões no plano de contabilização apresenta uma elevada resolução espacial por forma a garantir a uniformidade no interior de cada *pixel* durante o processo de amostragem da posição das partículas. Tal permite descrever correctamente zonas de elevado gradiente espacial de partículas. Na figura 4.7 estão representadas as fluências de electrões e fotões associadas às sub–fontes pontuais I e II.

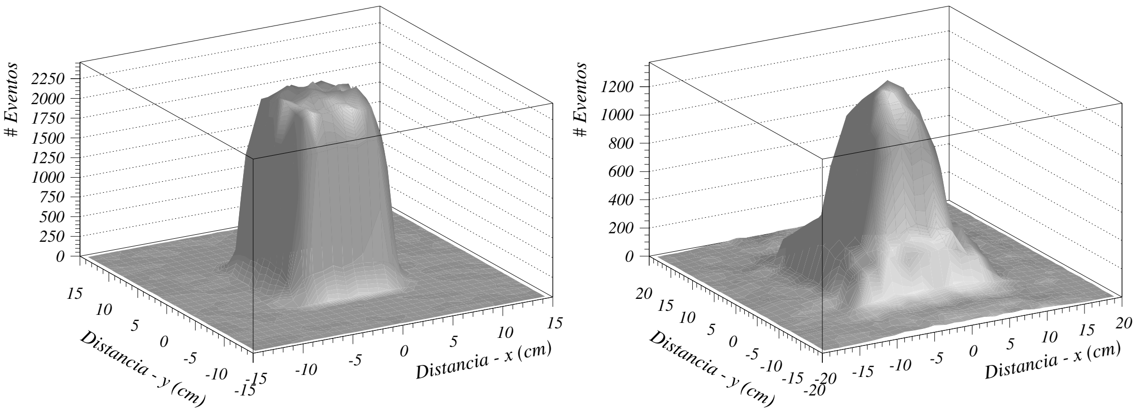


Figura 4.7: Fluências de electrões (*esquerda*) e fotões (*direita*) directos obtidas ao nível do plano de contabilização

No contexto deste modelo, a representação do espaço de fases de referência Φ é descrita por [Ma et al., 1997]:

$$\Phi(x, y, u, v, E) = \sum_{k=1}^{m} I_k f_k(E, x, y) \phi_k(x, y, u, v) \tag{4.1}$$

onde m é o número de sub–fontes, I_k é a intensidade relativa da sub–fonte k caracterizada pelas distribuições em energia, f_k, e fluência, ϕ_k . x, y, u, v e E são as coordenadas espaciais, cosenos directores e energia da partícula. Os parâmetros do modelo incluem a intensidade relativa, posição e dimensões de cada sub–fonte.

4.1.2 Reconstrução de Espaços de Fases

A reconstrução/geração do espaço de fases de referência foi efectuada por um algoritmo de amostragem que, para cada evento primário gerado, seleciona as características das partículas de acordo com os parâmetros do modelo e as distribuições de energia e fluência associadas a cada sub–fonte. O algoritmo foi implementado na subrotina `GUKINE` do código GEANT3. Durante a inicialização desta subrotina as distribuições associadas a cada sub–fonte foram normalizadas ao número total de eventos guardados em cada histograma, obtendo-se funções de densidade de probabilidade. Utilizando o método da transformada inversa, obtiveram-se funções de distribuição cumulativa uni ou bidimensionais [Bielajew, 2000]. Estas foram posteriormente utilizadas por subrotinas de re–amostragem [Brun, 1994] que fornecem ao utilizador números aleatórios segundo as distribuições originais de energia e fluência – Figura 4.8.

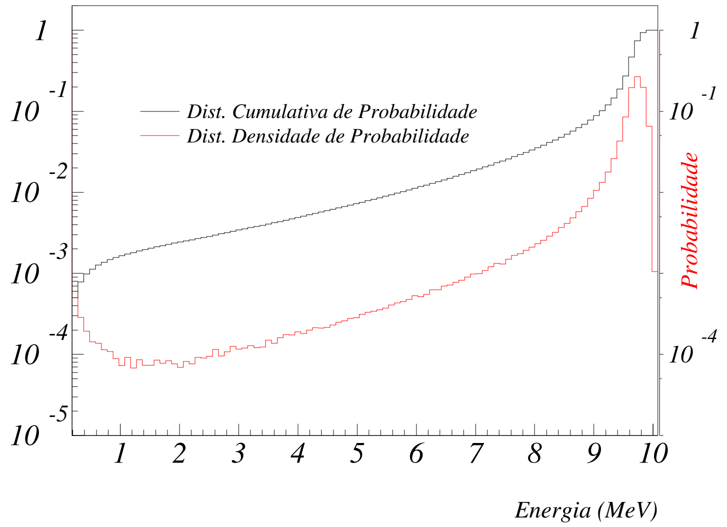


Figura 4.8: Funções de densidade de probabilidade e distribuição cumulativa utilizadas no processo de amostragem de um espectro de electrões directos

O processo de reconstrução/geração para cada partícula é iniciado com a selecção de uma das seis sub–fontes de acordo com as respectivas intensidades relativas. De seguida, a posição no plano de contabilização é amostrada da fluência associada à sub–fonte, e a energia da partícula amostrada de um dos espectros de energia de acordo com a posição selecionada (dentro ou fora do campo de radiação). A correlação entre o ângulo e posição da partícula não é considerada explicitamente, considerando-se que depende em primeira ordem do ponto na geometria da sub–fonte do qual se considera que a partícula é emitida [Ma et al., 1997]. Para as sub–fontes pontuais I e II, a direcção de incidência é reconstruida unindo a posição da partícula no plano de contabilização à sub–fonte pontual. O processo utilizado na amostragem do local de emissão das partículas nas sub–fontes extensas depende da geometria adoptada. Nas sub–fontes III e IV considera-se que cada ponto dos planos definidos apresenta uma distribuição de probabilidade de emissão de partículas uniforme. Nas sub–fontes do tipo linha V e VI a determinação do local de emissão é dividida em duas fases, a primeira para selecção de um dos lados do quadrado do qual a partícula é emitida de acordo com a implementação descrita por Jiang *et al* [Jiang et al., 2000], e a segunda para determinação do local exacto de emissão no lado do quadrado anteriormente escolhido. Este método assume que cada lado do quadrado emite partículas isotrópicamente com uma probabilidade de emissão uniforme. Nestas condições a probabilidade de um electrão ou fotão posicionado no plano de contabilização ser emitido de um ponto da linha quadrada é inversamente proporcional ao quadrado da distância entre os dois pontos. Após a determinação da posição na sub–fonte extensa a união com a posição selecionada no plano de contabilização determina a direcção de incidência da partícula.

O efeito da dispersão múltipla de electrões no ar é considerado pela adição de um termo perturbativo calculado pela teoria de Fermi–Eyges [Keall and Hoban, 1996] ao ângulo de incidência dos electrões. Esta teoria assume que as projecções do ângulo polar, θ, dos electrões no plano de contabilização são distribuições gaussianas caracterizadas por desvios padrões, iguais entre si para meios espacialmente homogéneos, σ. O ângulo polar obedece a uma distribuição gaussiana radial,

$$\frac{dN}{d\theta} = \frac{\theta}{\sigma^2}\ exp\ \left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right) \tag{4.2}$$

e o ângulo azimutal, ϕ, encontra-se distribuido uniformemente entre $[0,2\pi]$. Os valores de θ e ϕ em radiano são obtidos por amostragem:

$$\theta = \sigma\sqrt{-2\ \ln\ \xi_1} \tag{4.3}$$

$$\phi = 2\pi\ \xi_2 \tag{4.4}$$

onde ξ_1 e ξ_2 são dois números aleatórios independentes e uniformemente distribuidos entre]0,1]. De acordo com a teoria de Fermi–Eyges, o valor de σ em radiano é dado por:

$$\sigma^2 = \frac{1}{8}\ K(E)\ l \tag{4.5}$$

onde, l é a distância percorrida no ar em centímetro e $K(E)$ é o poder de dispersão linear no ar. Este pode ser calculado efectuando um ajuste aos dados experimentais tabelados no *ICRU 35 Report*, usando a parametrização,

$$K(E) = \alpha\ E^{-\beta} \tag{4.6}$$

onde, E é a energia do electrão em MeV, sendo α e β parâmetros de ajuste com valores 3.329×10^{-3} rad^{2}cm^{-1} e 1.638 respectivamente [Jiang et al., 2000]. Durante o processo de reconstrução/geração do espaço de fases de acordo com a amostragem da energia, posições no plano de contabilização e na geometria da sub–fonte o valor de σ é calculado para cada electrão selecionado. A amostragem dos valores de θ e ϕ é efectuada sendo posteriormente adicionados à direcção de incidência inicial do electrão.

O processo de amostragem implementado na subrotina `GUKINE` permite, reproduzir o espaço de fases original através da informação de distribuições de energia e fluência armazenadas em histogramas e mantidas numa *base de dados* ou *biblioteca*. Cada partícula primária selecionada fica caracterizada por uma energia, posição e cosenos directores sendo o seu transporte iniciado na subrotina `GUTREV` [Gianni et al., 1994] através da última componente do aplicador (com ou sem bloco de colimação adicional) e *fantoma* homogéneo de água.

4.1.3 Validação

O modelo desenvolvido para o acelerador linear Siemens KD2 foi utilizado para reconstruir o feixe de referência de energia 10 MeV e campo de radiação 10×10 cm^2. A sua validação foi efectuada por comparação da distribuição de dose obtida num *fantoma* homogéneo de água com dados experimentais. Curvas de dose em profundidade e perfis transversais foram simulados utilizando a informação do espaço de fases reconstruido – Figura 4.9, 4.11 e 4.12. Os volumes de integração para contabilização de dose apresentam dimensões idênticas às utilizadas para a validação

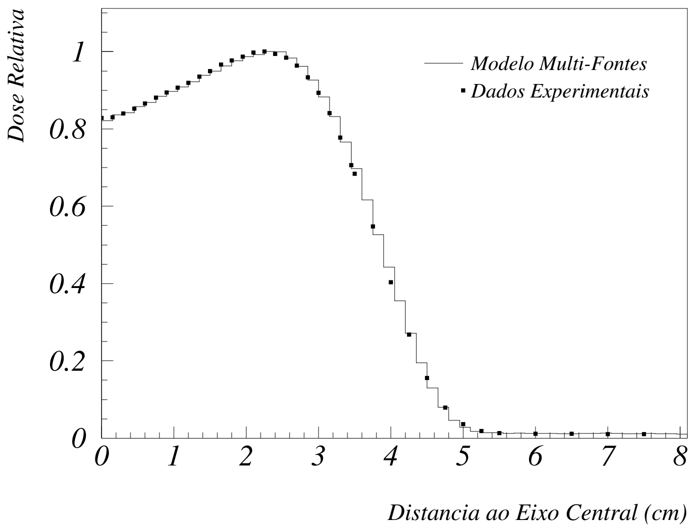


Figura 4.9: Curva de dose em profundidade obtida com o modelo multi–fontes para a configuração de referência e dados experimentais

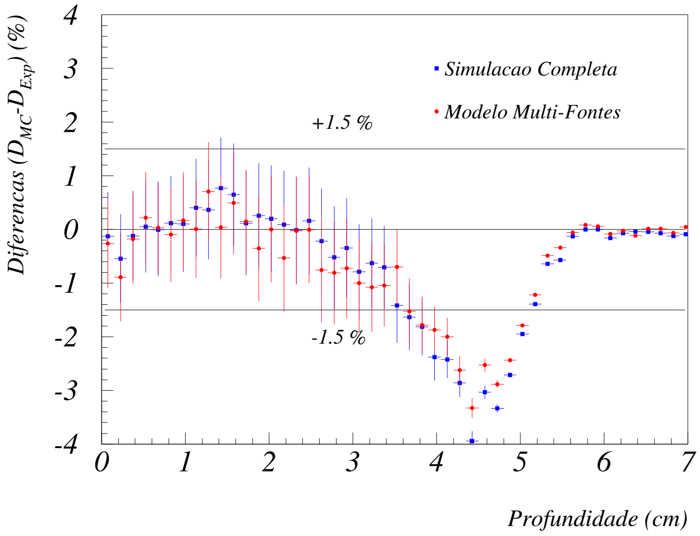


Figura 4.10: Diferenças percentuais entre dados experimentais e curvas de dose em profundidade simuladas por Monte Carlo completo e modelo multi–fontes

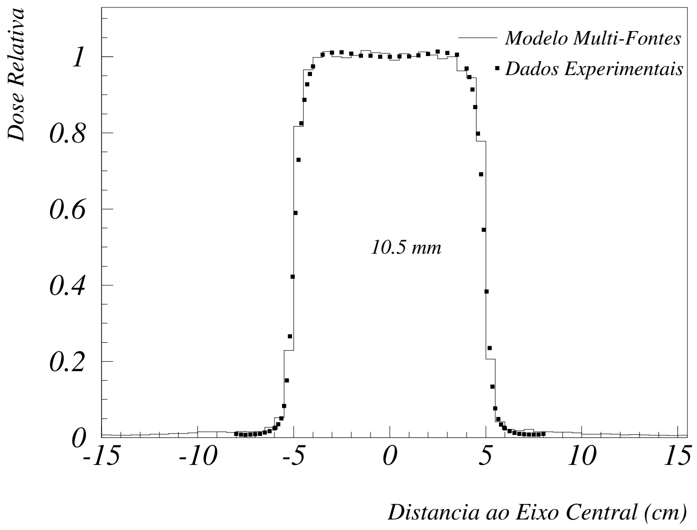


Figura 4.11: Perfil transversal à profundidade de 10.5 mm obtido com o modelo multi–fontes para a configuração de referência sobrepostos com dados experimentais

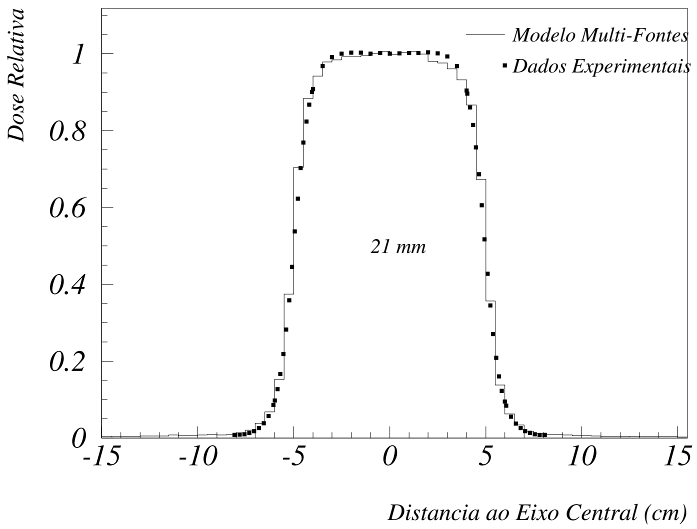


Figura 4.12: Perfil transversal à profundidade de 21 mm obtido com o modelo multi–fontes para a configuração de referência sobrepostos com dados experimentais

dos feixes de radiação no capítulo 3. As diferenças encontradas entre as curvas de dose em profundidade e os dados experimentais foram inferiores a 1.5%, apresentando um comportamento semelhante ao encontrado com simulação Monte Carlo "completa" – Figura 4.10. Os perfis transversais apresentam uma boa definição do campo de radiação, com desvios laterais máximos de 1 mm. Na simulação Monte Carlo "completa", alguns electrões dispersos de baixa energia com origem no aplicador não atingem o plano de contabilização sendo absorvidos pelas paredes em alumínio desta estrutura. No modelo multi–fontes, estas não se encontram incluídas na geometria da sub-fonte pelo que seria de esperar um maior número de electrões dispersos contribuindo para a dose fora dos limites do campo de radiação. C–M Ma [Ma et al., 1997] observou este efeito na sua implementação do modelo multi–fontes, estimando que para distâncias superiores a 2.0 cm da definição do campo de radiação esta contribuição impossibilitava a comparação directa com dados experimentais. No entanto, nos perfis transversais simulados a várias profundidades para a validação do feixe de referência tal não foi observado.

Estes resultados indicam que o modelo multi–fontes reproduz um feixe de radiação dosimetricamente equivalente ao gerado por simulação Monte Carlo "completa". Os presupostos assumidos no modelo não comprometem a precisão no cálculo de distribuições de dose em geometrias simples como o *fantoma* homogéneo. Fica demonstrado que o feixe de radiação é correctamente descrito pelas seis sub–fontes e respectivas intensidades relativas. Diferenças entre as distribuições de dose calculadas pelo espaço de fases gerado pelo modelo seriam fortes indicadores de uma incorrecta determinação dos seus parâmetros ou a utilização de um número insuficiente de sub–fontes para a descrição do feixe de radiação [Ma, 2001].

4.2 Extensão do Modelo

4.2.1 Outras Energias/Campos de Radiação

A extensão do modelo multi–fontes desenvolvido para uma configuração de referência a outras energias produzidas pelo acelerador Siemens KD2 e campos de radiação foi investigada. Devido à sua estrutura de implementação a geração de espaços de fases de diferentes energias de feixe é efectuada de forma directa durante o processo de reconstrução. O procedimento consiste em multiplicar os espectros do feixe de energia nominal de 10 MeV associados a cada sub–fonte por um factor de escala em energia. Este é determinado pela razão entre a energia do feixe que se pretende gerar e a energia de referência. Deste modo, cada valor de energia selecionado por amostragem das distribuições cumulativas de probabilidade do feixe de referência é multiplicado pelo factor calculado. Tal permite efectuar o processo de reconstrução do espaço de fases com espectros de electrões e fotões característicos de uma energia superior ou inferior a 10 MeV sem necessitar de efectuar o processo de representação. A extensão do modelo com base no feixe de referência de 10 MeV a outras energias de feixe requer no entanto que a componente contaminante de fotões seja ajustada em função da energia. Para tal calculou-se a razão η, definida como:

$$\eta = \frac{número\ de\ electrões}{número\ de\ fotões} \tag{4.7}$$

para as energias de 6, 8, 10, 12, 15 e 18 MeV, através da análise dos espaços de fases previamente validados. Verificou-se que η diminiu com a energia, devido ao aumento da secção eficaz de *bremsstrahlung* com a energia do feixe de electrões primários e à espessura de material utilizado (ouro ou aço) na folha de dispersão primária. As razões η foram normalizadas ao valor de η a 10 MeV – Tabela 4.3. A variação de $\eta_{(10MeV)}$ com a energia do feixe foi parametrizada por uma função do tipo dupla exponencial:

$$\eta_{(10MeV)}(E) = e^{A_1+B_1E} + e^{A_2+B_2E} \tag{4.8}$$

Energia (MeV)	η	$\eta_{(10MeV)}$
6.25	0.910	2.2358
8.00	0.672	1.6511
10.26	0.407	1
12.12	0.280	0.6879
15.51	0.180	0.4422
18.73	0.176	0.4324

Tabela 4.3: Variação da razão η e $\eta_{(10MeV)}$ com a energia do feixe incidente

com A_1 = 2.160, B_1 = -0.214 MeV^{-1}, A_2 = 5.869, B_2 = 0.245 MeV $^{-1}$. Esta parametrização descreve a variação de $\eta_{(10MeV)}$ a menos de 1–2% – Figura 4.13.

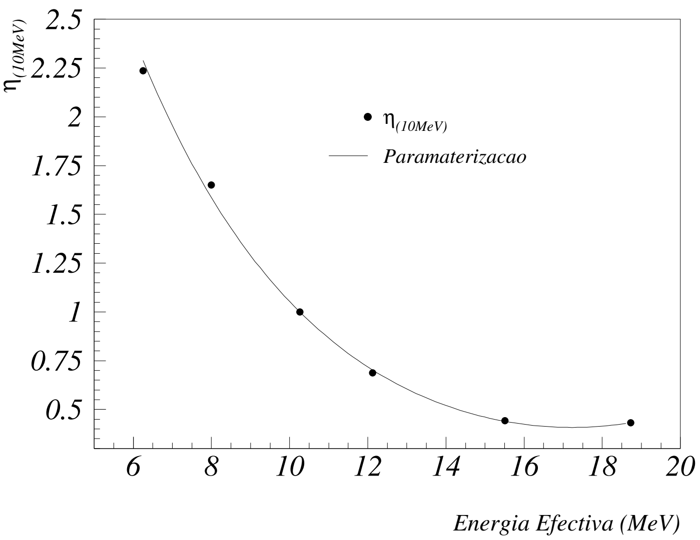


Figura 4.13: Parametrização de $\eta_{(10MeV)}$ com uma função do tipo dupla exponencial

A razão $\eta_{(10MeV)}$ foi utilizada na sub-routine `GUKINE` com um factor de correcção às intensidades relativas de emissão. Este factor aumenta e diminui respectivamente a probabilidade de emissão de electrões e fotões das diferentes sub–fontes para energias inferiores a 10 MeV e vice-versa para energias superiores. Esta aproximação considera que o aumento ou diminuição percentual de cada intensidade relativa das sub–fontes de fotões (II, IV, VI) é igual para as três sub–fontes. Estes métodos foram aplicados para a obtenção de eventos primários de espaços de fases reconstruídos pelo modelo multi–fontes para as cinco restantes energias do acelerador

Siemens KD2. A energia de 18 MeV foi escolhida para ilustrar o processo de ajuste da componente contaminante de fotões, tendo sido simuladas curvas de dose em profundidade a partir de espaços de fases com e sem factores de correcção $\eta_{(10MeV)}$ – Figuras 4.14 e 4.15.

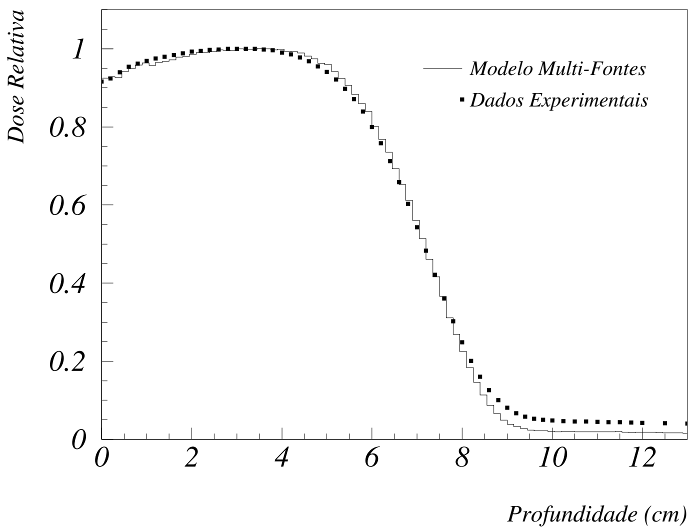


Figura 4.14: Curva de dose em profundidade a 18 MeV sem correção da componente de fotões contaminantes

Verificou-se que o processo de ajuste em energia e correcção da componente contaminante de fotões é suficiente para a obtenção de correctas distribuições de dose, mesmo para energias de feixe muito afastadas da energia de referência. Tal pode ser observado pelo bom acordo encontrado com os dados experimentais. A 18 MeV, a curva de dose em profundidade simulada sem a utilização do factor de correcção não descreve correctamente a dose na região de *bremsstrahlung* (a partir de 8.5 cm de profundidade), apresentando desvios da ordem dos 5%. Curvas de dose em profundidade e perfis transversais para as energias de 8 e 12 MeV são apresentadas nas figuras 4.16 4.17. Os resultados obtidos apresentam desvios máximos de 1.5% para curvas de dose em profundidade e 2 mm para perfis transversais a diferentes profundidades relativamente aos dados experimentais. Tal é indicativo de uma precisão semelhante à encontrada nas simulações Monte Carlo com a utilização de espaços de fases originais.

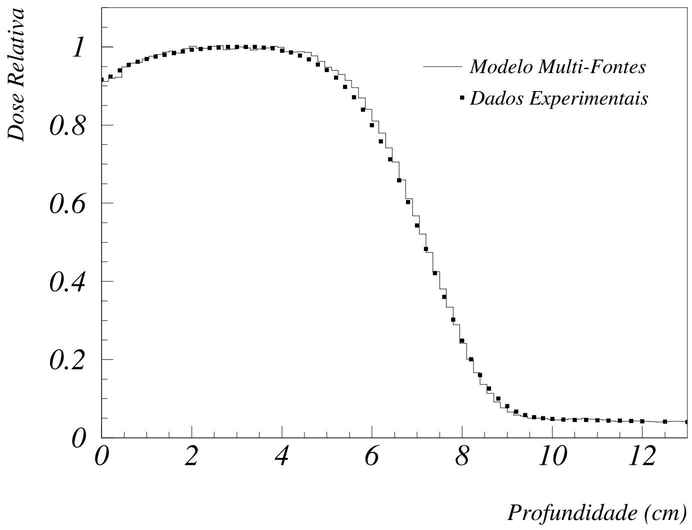


Figura 4.15: Curva de dose em profundidade a 18 MeV com correção da componente de fotões contaminantes

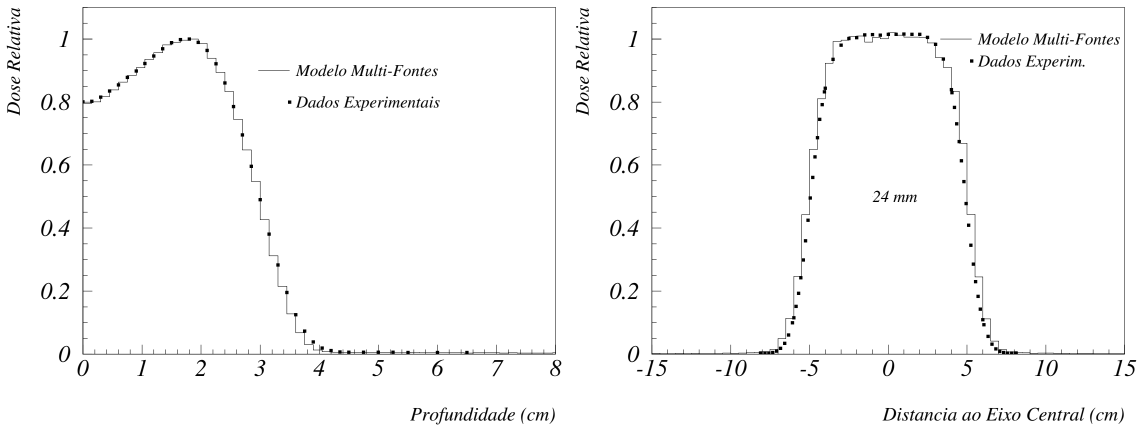


Figura 4.16: Curva de dose em profundidade (*esquerda*) e perfil transversal à profundidade de 24 mm (*direita*) para a energia de 8 MeV obtidos com o modelo multi–fonte

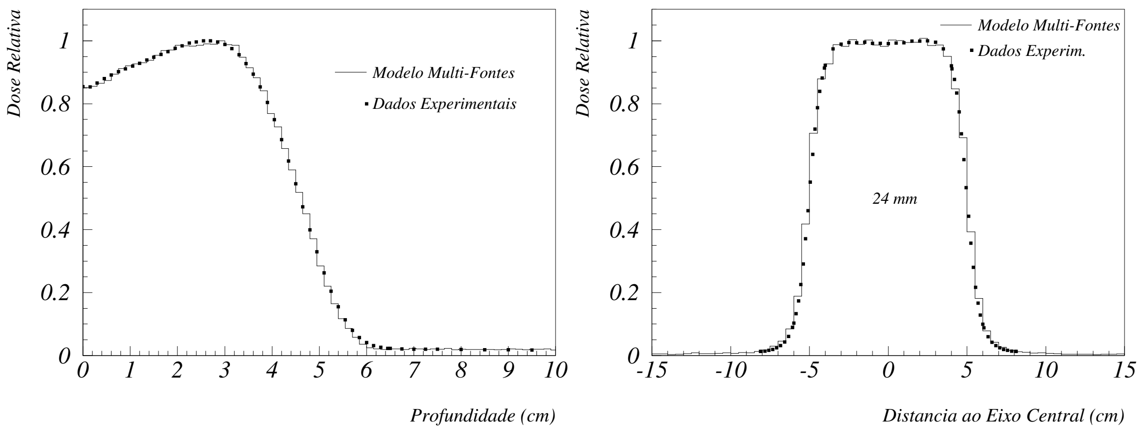


Figura 4.17: Curva de dose em profundidade (*esquerda*) e perfil transversal à profundidade de 24 mm (*direita*) para a energia de 12 MeV obtidos com o modelo multi–fonte

O princípio utilizado para gerar espaços de fases de feixes de electrões para as várias energias do acelerador Siemens KD2 permite igualmente obter campos de radiação de outras dimensões ajustando as fluências da cada sub–fonte. O factor de escala é determinado pela razão entre as larguras do novo campo de radiação e do campo de referência, 10×10 cm^2. Durante o processo de reconstrução, cada posição selecionada a partir das distribuições cumulativas bidimensionais de fluências é multiplicado pelo factor de escala geométrico. As dimensões das sub–fontes planares e linear quadrada foram ajustadas em função do campo de radiação. Este processo permite reconstruir espaços de fases para campos de radiação de dimensões superiores ou inferiores com a mesma geometria do campo de radiação de referência. Este método foi validado simulando um campo de radiação ajustado para 15×15 cm^2 e energia nominal de 10 MeV – Figura 4.18. Os resultados encontrados revelam uma boa definição de campo com diferenças máximas de 2 mm relativamente aos dados experimentais.

Com base nestes resultados conclui-se que o modelo multi–fontes permite gerar diferentes configurações de feixes de electrões do acelerador Siemens KD2 a partir de um feixe de 10 MeV para um campo 10×10 cm^2. O conhecimento das energias efectivas e factores de correcção de fotões contaminantes requer a simulação e análise de espaços de fases para os restantes feixes produzidos pelo acelerador para

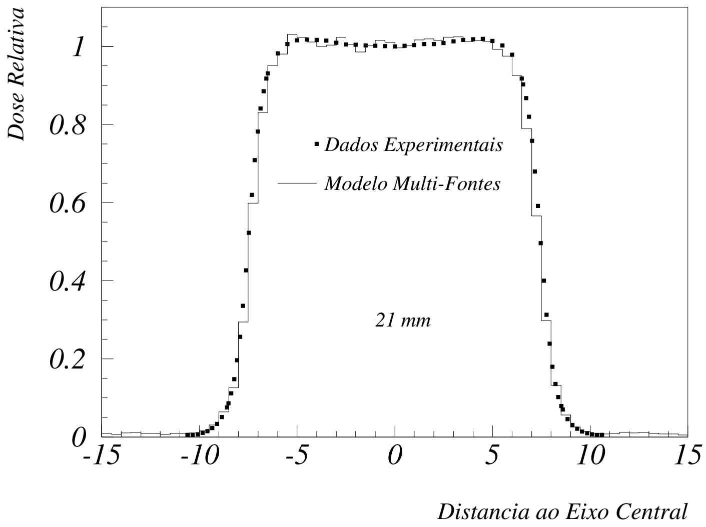


Figura 4.18: Perfil transversal à profundidade de 21 mm obtido para o campo escalado de 15×15 cm^2

um mesmo campo de radiação. Esta dependência pode ser eliminada através de um processo de sucessivos ajustes do factor de escala em energia partindo dos valores de energia nominais.

Os ganhos estimados de eficiência apresentados pelo modelo multi–fontes para os feixes de electrões de 6–18 MeV do acelerador Siemens KD2 foram avaliados. A eficiência, ϵ, é definida como [Bielajew, 2000]:

$$\epsilon = \frac{1}{s^2 T} \tag{4.9}$$

em que T é o tempo de cálculo e s^2 a variância. Num sistema DIGITAL 600au, equipado com um processador Alpha 64-bits a 600 MHz, o tempo de cálculo necessário para o processo de amostragem e reconstrução do espaço de fases é da ordem de 1 minuto para um total de $1{\times}10^6$ eventos. O tempo necessário para obtenção de espaços de fases para as várias energias de feixe por simulação Monte Carlo "completa", para o mesmo número de eventos foi estimado em cerca de 96 horas (6 MeV) e 120 horas (18 MeV). A razão das eficiências dos dois métodos é de $\epsilon_{(multifonte)}/\epsilon_{(completo)} \approx 6000$ (6 MeV) a 7700 (18 MeV) indicando que neste modelo, praticamente todo o tempo de cálculo é utilizado na simulação de distribuições de dose. A redução em espaço de disco foi igualmente avaliada devido à aplicação desta metodologia. As dimensões da biblioteca contendo espaços de fases, com cerca de 1×10^6 eventos para energias de 6–18 MeV simulados com GEANT3 – Capítulo 3 – são da ordem do 2–2.5 *Gbyte*. As dimensões da biblioteca de distribuições de energia e fluência são significativamente reduzidas, cerca de 7 *Mbyte*. O modelo multi–fontes permite a redução do espaço de disco necessário por um factor 285–350.

4.2.2 Outros Aceleradores Lineares

As potencialidades da aplicação do modelo multi–fontes a outros aceleradores lineares em modo de tratamento com feixes de electrões foram estudadas. O modelo multi–fontes utilizado para o acelerador Siemens KD2, foi adaptado para a reconstrução de espaços de fases referentes a feixes de radiação produzidos por dois aceleradores distintos, Siemens Mevatron MD2 e General Electric Saturne–42. O acelerador Siemens MD2 apresenta uma geometria semelhante ao Siemens KD2, diferindo na gama de energias disponiveis: 6–21 MeV. O segundo acelerador apresenta uma geometria distinta do Siemens KD2/MD2 que se assume desconhecida para a aplicação do modelo com energias de feixe entre 4–21 MeV. Nesta abordagem considera-se que as intensidades relativas de cada sub–fonte calculadas para a energia de 10 MeV do acelerador Siemens KD2 se mantêm practicamente inalteradas para diferentes geometrias. Deste modo assume-se que os feixes de radiação dos novos aceleradores podem ser gerados exclusivamente a partir do ajuste das distribuições em energia e fluência da configuração de referência. Este procedimento requer a determinação dos factores de escala em energia sem conhecer à partida as energias efectivas dos aceleradores que se pretendem modelar. Para tal, os factores de escala em energia devem passar a depender de parâmetros experimentais derivados de grandezas dosimétricas sensiveis à energia inicial do feixe de electrões. Dos parâmetros extraídos das curvas de dose em profundidade experimentais: profundidade da dose máxima (R_{100}), percurso máximo (R_p) e a profundidade à qual a dose se reduz a 50% (R_{50}) escolheu-se este último por apresentar uma maior sensibilidade a pequenas variações da energia inicial. Dado que os novos espaços de fases são reconstruidos a partir das distribuições do Siemens KD2, as energias efectivas dos novos aceleradores devem ser determinadas a partir da relação existente entre os valores de R_{50} e as energias efectivas do acelerador de referência.

Energia (MeV)	R_{50} (cm)
6.25	2.22
8.00	2.93
10.26	3.87
12.12	4.60
15.51	5.87
18.73	7.13

Tabela 4.4: Valores de R_{50} medidos para as energias do acelerador Siemens Mevatron KD2

A relação entre os valores experimentais de R_{50} determinados a partir das curvas de dose em profundidade experimentais – Tabela 4.4 – e a energia efectiva é apresentada na figura 4.19. Foi encontrada uma relação linear ($\chi^2/ndf = 0.564$) entre as duas variáveis com R_{50} em centímetro, e energia efectiva em MeV [Ding et al., 1996]

$$R_{50} = \mu \; E_{efectiva} - \epsilon \tag{4.10}$$

com $\mu = 0.3921$ cmMeV^{-1} e $\epsilon = 0.1945$ cm. De notar, que as energias efectivas assim determinadas para os aceleradores Siemens MD2 e GE Saturne–42 podem ser diferentes das energias efectivas reais. No entanto estas permitem derivar os factores de escala que melhor adaptam as distribuições de energia do modelo por forma a obter as distribuições de dose caracteristicas dos novos aceleradores. A partir das curvas de dose em profundidade experimentais para feixes de electrões com energia nominal de 9 MeV produzidos pelos aceleradores Siemens MD2[1] e GE Saturne–42[2] foram determinados os valores de R_{50}. Da relação (4.10) obtiveram-se os valores das energias efectivas e calcularam-se os respectivos factores de escala e de correcção $\eta_{(10MeV)}$. A curva de dose em profundidade simulada para o acelerador Siemens MD2 – Figura 4.20 – apresenta um bom acordo com os dados experimentais, com desvios inferiores a 1.5–2%.

Devido às semelhanças entre as geometrias dos aceleradores Siemens KD2 e MD2 o ajuste dos factores em energia é suficiente para a reconstrução de espaços de fases

[1]Dados experimentais cedidos pelo Serviço de Radioterapia do Hospital de Santa Maria, Lisboa

[2]Dados experimentais cedidos pelo Serviço de Radioterapia do Instituto Português de Oncologia Fernando Gentil, Lisboa

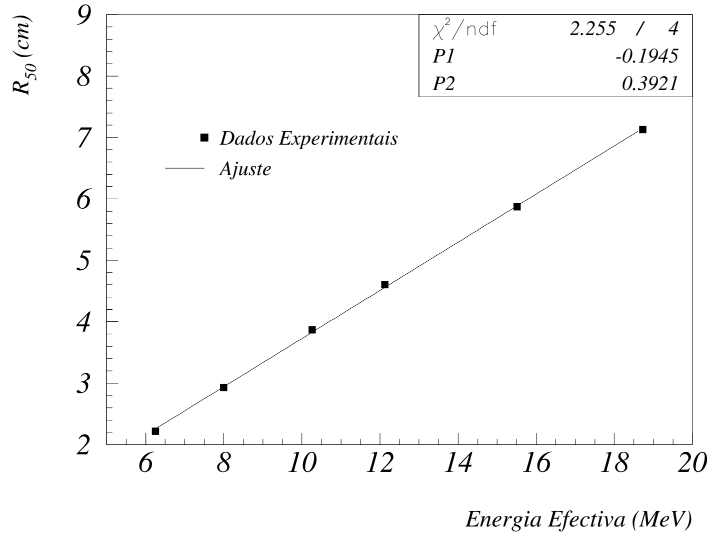


Figura 4.19: Linearidade dos valores experimentais de R_{50} em função da energias efectivas encontradas para o acelerador linear Siemens KD2

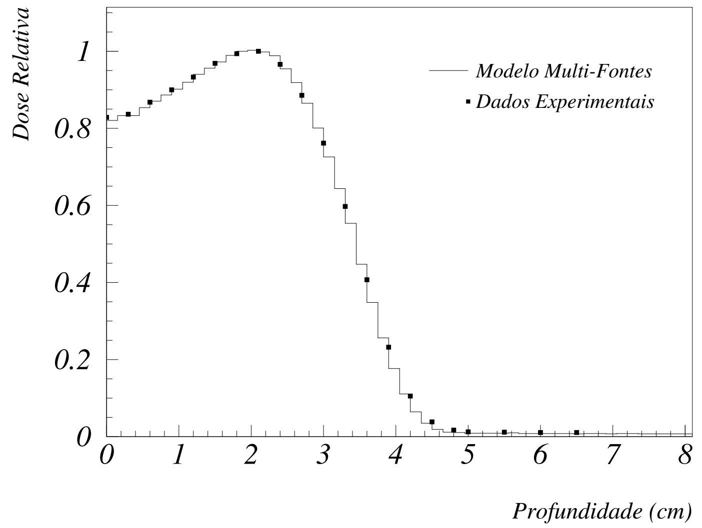


Figura 4.20: Curva de dose em profundidade obtida com o modelo multi–fontes para o acelerador Siemens MD2 para a energia nominal de 9 MeV

do novo acelerador. A curva de dose em profundidade simulada pelo modelo multi–fontes para o acelerador GE Saturne–42 pelo simples ajuste da energia, apresentou diferenças (*não mostrado*) da ordem dos 3% na região do *build–up*. Os resultados calculados por Monte Carlo eram sistematicamente inferiores na região de 0 a 1.5 cm de profundidade. A dose depositada nesta região deve-se em parte a electrões dispersos no aplicador externo e colimadores secundários [Zhang et al., 1999]. A discrepância encontrada foi atribuida a prováveis diferenças na geometria e/ou materiais constituintes destas componentes, responsáveis por variações nas intensidades relativas. Por forma a compensar este efeito, as intensidades relativas das sub–fontes responsáveis pela simulação da emissão de electrões dispersos foram aumentadas em 2%.

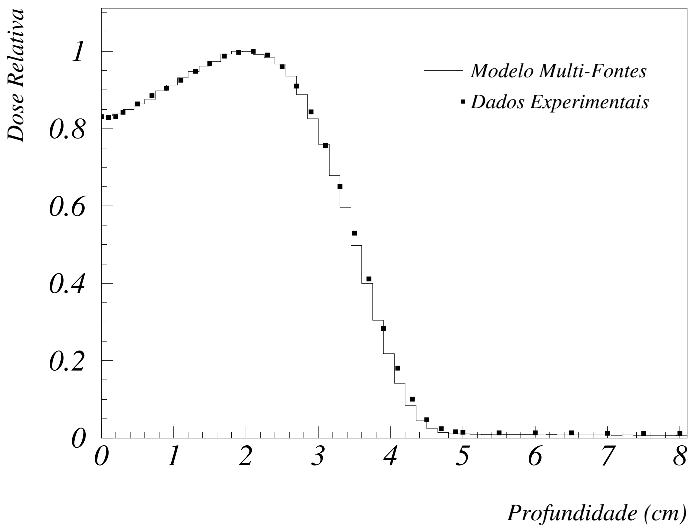


Figura 4.21: Curva de dose em profundidade obtida com o modelo multi–fontes para o acelerador GE Saturne–42 para a energia nominal de 9 MeV

Utilizando este procedimento, obteve-se um bom ajuste entre as curvas de dose em profundidade simuladas e experimentais com diferenças da ordem de 1% – Figura 4.21. Estes resultados demonstram a capacidade e fiabilidade do modelo multi–fontes em descrever feixes de radiação para aceleradores sobre os quais não existe informação técnica detalhada, necessária para a sua simulação por Monte Carlo. Este método requer apenas a determinação dos factores de escala em energia através de parâmetros experimentais, correcção de fotões contaminantes e o ajuste das intensidades relativas para a sua adaptação a aceleradores de diferentes arquitecturas. A utilização de códigos de Monte Carlo baseados em rápidos esquemas de transporte de radiação [Sempau et al., 2000, Rogers and Kawrakow, 2001] para cálculo de dose torna este procedimento ainda mais eficiente e interactivo.

Referências

[Battum and Huizenga, 1999] Battum, L. J. and Huizenga, H. (1999). On the inicial angular variances of clinical electron beams. *Phys. Med. Biol*, 44:2803–20.

[Bielajew, 2000] Bielajew, A. F. (2000). *Fundamentals of the Monte Carlo Method for Neutral and Charged Transport*, chapter 4, Sampling theory, pages 35–52. The University of Michigan.

[Brun, 1994] Brun, R. (1994). *HBOOK – Statistical Analysis and Histogramming.* CERN – European Organization for Nuclear Research. CERN Program Library-Long Writeup Y250.

[Ding et al., 1996] Ding, G. X., Rogers, D. W. O., and Mackie, T. R. (1996). Mean energy, energy–range relationships and depth –scaling factors for clinical electron beams. *Med. Phys.*, 23:361–76.

[Fix et al., 2001] Fix, M. F., Stampanoni, M., Manser, P., Born, E. J., Mini, R., and Rüegsegger, P. (2001). A multiple source model for 6 MV photon beam dose calculations using Monte Carlo. *Phys. Med. Biol.*, 46:1407–1427.

[Gianni et al., 1994] Gianni, S., Ravndal, S., and Maire, M. (1994). *GEANT – Detector Description and Simulation Tool.* CERN – European Organization for Nuclear Research, October edition. CERN Program Library Long Writeup W5013.

[Jiang et al., 2000] Jiang, S. B., Kapur, A., and Ma, C.-M. (2000). Electron beam modeling and commissioning for Monte Carlo treatment planning. *Med. Phys.*, 27(1):180–91.

[Keall and Hoban, 1996] Keall, P. J. and Hoban, P. W. (1996). Calculating the angular standard deviation of electron beams using Fermi–Eyges theory. *Phys. Med. Biol.*, 41:1511–15.

[Ma, 2001] Ma, C.-M. (2001). Comunicação Pessoal.

[Ma et al., 1997] Ma, C.-M., Faddegon, B. A., Rogers, D. W. O., and Mackie, T. R. (1997). Accurate characterization of Monte Carlo calculated electron beams for radiotherapy. *Med. Phys.*, 24:401–16.

[Ma and Jiang, 1999] Ma, C.-M. and Jiang, S. B. (1999). Monte Carlo modelling of electron beams from medical accelerators. *Phys. Med. Biol*, 44:R157–89. Topical Review.

[Ma et al., 1999] Ma, C.-M., Mok, E., Kapur, A., Pawlicki, T., Findley, D. O., Brain, S., Forster, K., and Boyer, A. L. (1999). Clinical implementation of a Monte Carlo treatment planning system. *Med. Phys.*, 26(10):2133–43.

[Rogers and Kawrakow, 2001] Rogers, D. W. O. and Kawrakow, I. (2001). Monte Carlo treatment planning for radiotherapy. In Overgaard, J., editor, *Proc. 6th Biennial ESTRO Meeting on Physics in Clinical Radiotherapy, Sevilla, Spain, Rad. and Onc.*, volume 51(Supplement 1), page S26. ESTRO – European Society for Therapeutic Radiology and Oncology, Elsevier Science Inc. Abstract 58.

[Sempau et al., 2000] Sempau, J., Wilderman, S. J., and Bielajew, A. F. (2000). DPM, a fast accurate Monte Carlo code optimized for photon and electron radiotherapy treatment planning dose calculations. *Phys. Med. Biol.*, 45:2263–91.

[Zhang et al., 1999] Zhang, G. G., Rogers, D. W. O., Cygler, J., and Mackie, T. R. (1999). Monte Carlo investigation of electron beam output factors vs size of square cutout. *Med. Phys.*, 26(5):743–50.

Capítulo 5

Sistema de Cálculo Rápido de Dose

O elevado tempo de cálculo necessário à simulação de distribuições de dose em *fantomas* com o código GEANT ou outros códigos de Monte Carlo *generalistas*, não permite retirar total partido da eficiência do modelo multi–fontes desenvolvido anteriormente. A utilização de sistemas de processamento em paralelo ou de múltiplos processadores permite reduzir o tempo de cálculo, requerendo no entanto um investimento significativo em *hardware* e em infraestruturas adequadas [Ma and Jiang, 1999, Rodrigues et al., 2001]. Recentemente, uma nova classe de códigos de transporte de Monte Carlo optimizados para aplicações de cálculo de dose em Radioterapia foi desenvolvida, permitindo ultrapassar estas limitações.

A escolha de um código de transporte dedicado – DPM (*Dose Planning Method*) – [Sempau et al., 2000] e a sua adaptação ao modelo multi–fontes permitiu desenvolver um sistema de cálculo rápido de dose de baixo custo e elevada eficiência para o processo completo de simulação. A implementação deste sistema numa unidade de Radioterapia permite a obtenção de grandezas dosimétricas e distribuições de dose em condições específicas de irradiação, em tempos compatíveis com a práctica clínica, podendo ainda ser utilizado como meio de verificação de resultados fornecidos por sistemas de planeamento comerciais em alternativa ao procedimento experimental [Ding et al., 1999]. Neste capítulo são apresentadas algumas aplicações dosimétricas simples com interesse clínico, para avaliação da precisão no cálculo de dose e tempos de execução do sistema.

5.1 Implementação do Sistema de Cálculo de Dose

O código de Monte Carlo *dedicado Dose Planning Method* foi desenvolvido para a simulação de transporte acoplado electrão–fotão em aplicações de Radioterapia para uma gama de energia compreendida entre 0.5 e 50 MeV. A sua elevada eficiência de cálculo relativamente a códigos de Monte Carlo tais como EGS ou GEANT deve-se à presença de esquemas de transporte e simulação optimizados – Capítulo 2. A simulação do transporte das partículas através de redes de elementos de volume cúbicos ou paralelepipédicos (*voxels*) posteriormente preenchidos com diferentes materiais, representa uma vantagem para a construção de geometrias complexas. De uma forma genérica, estas características justificam a sua escolha para a realização do transporte de feixes de electrões e contabilização da dose depositada em *fantomas* em substituição do código GEANT.

O esquema de amostragem do modelo multi–fontes implementado anteriormente na subrotina `GUKINE` do código GEANT3 para reconstrução de espaços de fase foi utilizado para a geração de eventos primários no DPM. O processo consiste na transferência das características cinemáticas de cada partícula amostrada nesta subrotina para uma determinada configuração de feixe seleccionada por ajuste dos parâmetros do modelo multi–fontes, para o referêncial do DPM. Este algoritmo efectua posteriormente o transporte da partícula através da última componente do aplicador externo de electrões e pela geometria do *fantoma* – Figura 5.1. A optimização de parâmetros relacionados com o processo de transporte foi efectuada para o código DPM. Os valores de corte em energia para o transporte de electrões e fotões foram de 200 keV e 50 keV respectivamente. A energia de corte para electrões corresponde a um percurso em água de aproximadamente 1 mm, sendo este valor da ordem das dimensões típicas de *voxels* utilizados para contabilização de dose. Devido à não simulação da emissão de radiação de fluorescência, o corte de energia para fotões foi colocado acima do valor da energia de ligação dos electrões orbitais de camadas internas de materiais de elevado número atómico. A energia de electrões com origem em interacções por efeito fotoeléctrico é considerada depositada localmente, não sendo efectuada a sua simulação explícita. O comprimento mínimo e máximo do passo dos electrões entre eventos de dispersão múltipla, foi escolhido por forma a manter a validade física dos resultados obtidos com o algoritmo de transporte, tendo sido fixados valores de 0.5 cm e 1.0 cm em água.

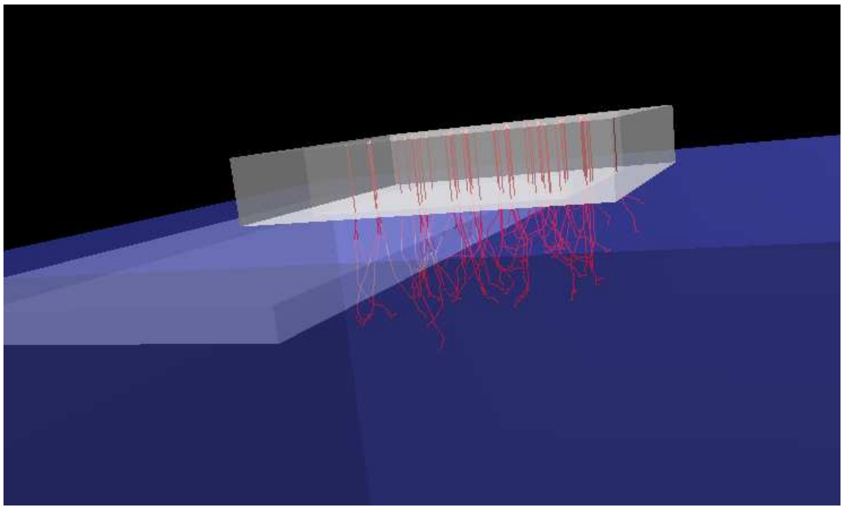


Figura 5.1: Simulação de 50 electrões gerados pelo modelo multi–fontes e transportados pelo algoritmo DPM através da última componente do aplicador e *fantoma* heterogéneo água–ar. Não se encontram representados fotões secundários

5.1.1 Validação

O sistema de cálculo de dose baseado no código DPM foi utilizado para a simulação da distribuição de dose para a configuração de energia 10 MeV e campo de radiação 10×10 cm^2 do acelerador Siemens KD2, gerada pelo modelo multi–fontes, num *fantoma* homogéneo de água. A curva de dose em profundidade segundo o eixo central de radiação e perfis transversais de dose a diferentes profundidades foram extraídos da distribuição simulada e comparados com dados experimentais. Nas figuras 5.2 e 5.3 são apresentadas respectivamente, a curva de dose em profundidade normalizada ao valor máximo da dose e o perfil transversal obtido à profundidade de 21 mm normalizado ao valor da dose correspondente ao eixo central de radiação. Foram encontrados desvios máximos de 1.5% na curva de dose em profundidade e diferenças laterais inferiores a 2 mm nos perfis transversais simulados indicando um bom acordo com os dados experimentais. Estes resultados revelam ainda que o código DPM apresenta um nível de precisão para o cálculo de dose semelhante ao encontrado com o código GEANT3 – Capítulo 4.

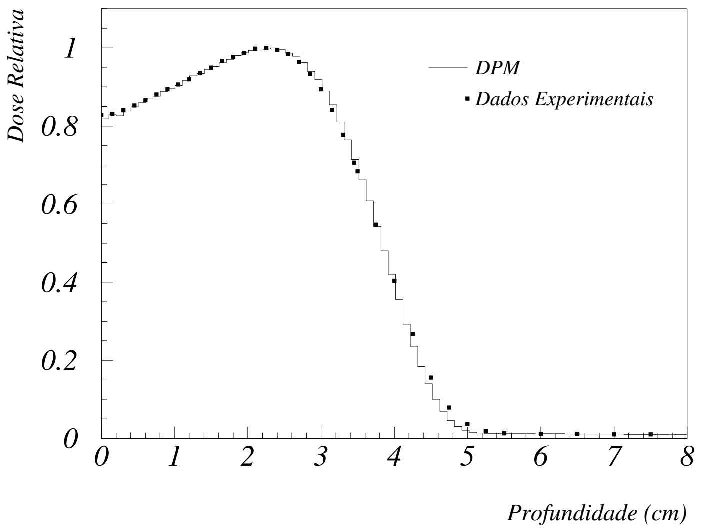


Figura 5.2: Curva de dose em profundidade simulada com o código DPM para a configuração de referência do modelo multi–fontes

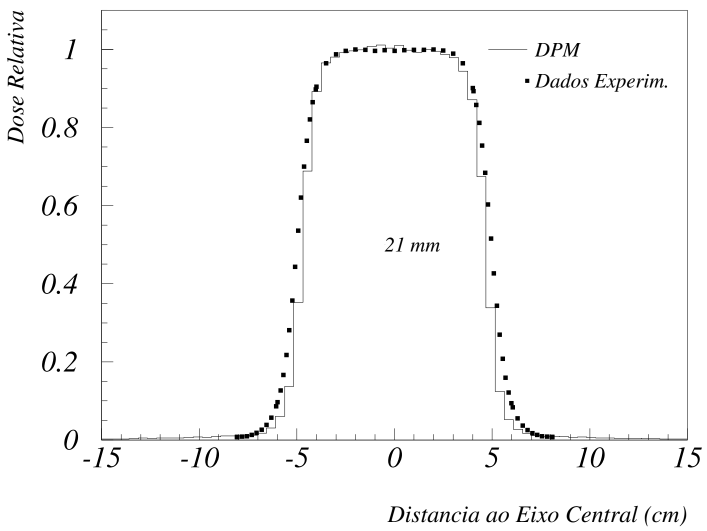


Figura 5.3: Perfil transversal simulado por DPM à profundidade de 21 mm no *fantoma* homogéneo de água

5.2 Aplicações Dosimétricas

O desempenho do código DPM acoplado ao modelo multi–fontes como sistema de cálculo rápido de dose foi avaliado num conjunto de aplicações dosimétricas. A primeira consiste na simulação de distribuições de dose num *fantoma* homogéneo de água na presença de camadas de ar com diferentes espessuras junto do plano de tratamento [Trindade et al., 2001], bem como a determinação de razões de débito nestas condições de irradiação. A precisão de cálculo e eficiência do sistema foram comparadas com o código de Monte Carlo GEANT3 e com um sistema de planeamento comercial PLATO (versão 2.3.3)[1] – *PLanning And Treatment Optimization* – existente no Serviço de Radioterapia do Centro Regional de Coimbra do Instituto Português de Oncologia Fernando Gentil (IPOFG–CROC). Na segunda aplicação foram simuladas distribuições de dose em *fantomas* heterogéneos com geometrias simples apresentando interfaces do tipo ar–água. O sistema de cálculo foi ainda utilizado para a simulação de um bloco de colimação adicional para formação de um campo de radiação de geometria irregular utilizado em tratamentos com feixe de electrões.

Os *fantomas* homogéneos e heterogéneos codificados no código DPM utilizados nestas aplicações foram construídos com 64×64×200 *voxels* apresentando um volume de integração para o cálculo de dose de $0.5\times0.5\times0.1$ cm^3. Os valores de dose depositada foram armazenados em matrizes tridimensionais durante as simulações e transferidas para *Ntuples*. Utilizando o programa de análise PAW e funções de corte ou selecção [Brun et al., 2000], foram posteriormente preenchidos histogramas bidimensionais em planos paralelos e/ou perpendiculares ao eixo de incidência do feixe. As simulações efectuadas com o código GEANT3 foram realizadas com volumes de integração semelhantes ao do DPM sendo as distribuições de dose guardadas em histogramas bidimensionais previamente definidos. As distribuições espaciais de radiação no *fantoma* produzidas pelos feixes foram caracterizadas pelas respectivas curvas de isodose, representadas por linhas ao longo das quais a dose absorvida é constante. Os resultados são apresentados sob a forma de linhas de isodose reconstruídas pelo algoritmo de interpolação linear disponível no programa PAW a partir das distribuições de dose simuladas. Este procedimento foi adoptado

[1] Nucletron, Holanda

para a análise dos resultados de GEANT3 e DPM assim como para os cálculos do sistema de planeamento PLATO.

5.2.1 *Fantomas* Homogéneos

Nos tratamentos com feixes de electrões, a presença de irregularidades anatómicas representa um problema práctico de ajuste completo do aplicador externo à superfície de irradiação. Desta forma, em determinados tratamentos é inevitável a presença de intervalos de ar junto do plano de incidência, tipicamente entre 1.0 cm e 5.0 cm, que modificam a distribuição de dose produzida pelo feixe de electrões [Khan et al., 1991] – Figura 5.4.

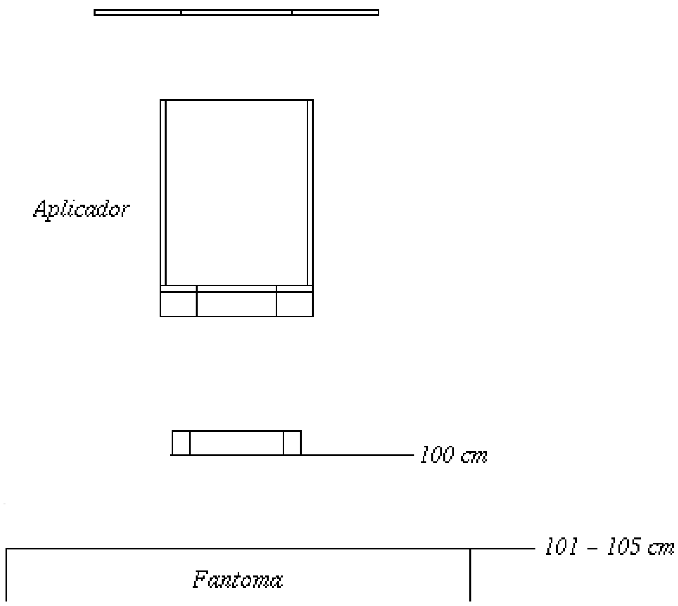


Figura 5.4: Posições relativas do aplicador para modo de tratamento com feixes de electrões e da superfície do *fantoma* homogéneo na presença de uma camada de ar

A existência de uma camada de ar induz o aumento da divergência das linhas de dose mais baixas e a diminuição da área útil de tratamento, envolvida pela linha de 80% de dose. Com o aumento da espessura de ar, as alterações à distribuição angular do feixe ao nível do plano de incidência, devido a processos de dispersão dos electrões tornam-se mais evidentes, contribuindo para o aumento da região de penumbra e diminuição da dose absorvida na área útil de tratamento. Durante o planeamento é necessário corrigir as distribuições de dose idealizadas por forma a compensar estes efeitos. Para tal são geralmente efectuadas medições dosimétricas de razões de débito (*output factors*– OF), curvas de dose em profundidade e perfis transversais em condições experimentais que reproduzem a presença de camadas de ar em *fantomas* homogéneos de água.

O estudo da influência de camadas de ar em distribuições de dose de um feixe de energia 10 MeV e campo radiação de 10×10 cm^2 foi efectuado com o sistema de cálculo desenvolvido e por simulação Monte Carlo "completa" com o código GEANT3. Deste modo, a interacção do feixe de electrões com um *fantoma* homogéneo de água na presença de camadas de ar até 5.0 cm com intervalos de 1.0 cm foi simulada. As linhas de isodose reconstruídas foram comparadas com dados experimentais de curvas de dose em profundidade e perfis transversais obtidos com uma câmara de Markus (PTW–23343), num *fantoma* homogéneo de água colocado a SSD's correspondentes às camadas de ar pretendidas. Na figura 5.5 são apresentados os resultados obtidos para as espessuras de ar de 1.0 cm e 4.0 cm.

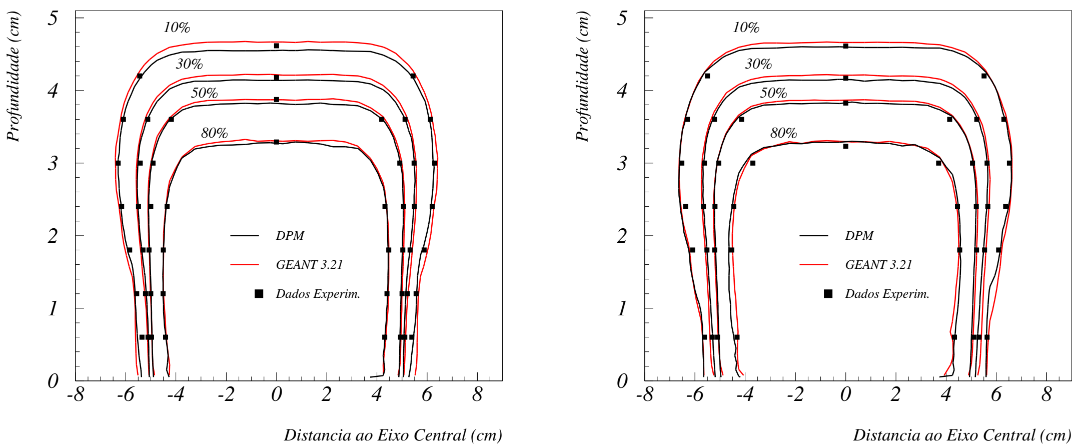


Figura 5.5: Linhas de dose de 80%, 50%, 30% e 10% simuladas por GEANT3 e DPM para 1.0 cm (*esquerda*) e 4.0 cm (*direita*) de espessura de ar, sobrepostas com dados experimentais

Observa-se um bom acordo entre as simulações e os dados experimentais indicando uma correcta descrição da dispersão e absorção do feixe ao longo do *fantoma*, tendo sido encontrados desvios laterais inferiores a 1.0 mm na região de penumbra a baixas profundidades. No entanto, segundo o eixo central de radiação verificam-se diferenças de 1.0 mm entre os dois códigos de Monte Carlo para as linhas de isodose de 30% e 10%, reconstruídas a partir da distribuições de dose simuladas. Tal foi atribuido aos diferentes formalismos implementados para a descrição e simulação do processo de dispersão múltipla de Coulomb, que no código GEANT3 é modelado pela teoria de Molière, enquanto que no DPM foi utilizada a formulação de Goudsmit–Saunderson–Lewis, com a inclusão de efeitos de correcção de *spin*. Estes factores de correcção reflectem-se num aumento do alcance efectivo e divergência dos electrões em materiais com baixo número atómico apresentando um comportamento oposto para materiais de elevado número atómico. Pequenos ajustes na energia inicial do feixe primário de electrões efectuados durante o processo de reconstrução do espaço de fases pelo modelo multi-fontes permitem obter um melhor acordo na simulação com DPM, embora desvios de 0.5 mm para baixos valores de dose entre este código e dados experimentais não sejam considerados clinicamente relevantes.

Os valores das razões de débito foram determinadas a partir das curvas de dose absoluta em profundidade, para cada espessura de camada de ar simulada com GEANT3 e DPM. Neste estudo, esta grandeza dosimétrica pode ser definida como a razão entre a dose absoluta máxima para a configuração simulada na presença de camada de ar por unidade–monitor (MU) e a dose absoluta máxima para o campo de referência 10×10 cm^2 por MU:

$$OF = \frac{Dose/MU(conf, R_{100})}{Dose/MU(conf_0, R_{100,0})} \tag{5.1}$$

em que R_{100} é a profundidade para a qual a dose é máxima no *fantoma* de água. As unidades–monitor são uma medida da ionização induzida pelo feixe de electrões na camâra de ionização existente na cabeça de tratamento, que se relaciona directamente com a fluência ponderada em energia integrada num dado intervalo de tempo. Através de um processo de calibração experimental, é estabelecida uma relação entre a dose depositada num determinado volume no interior do *fantoma* e o número de unidades–monitor. O valor da dose absoluta por unidades MU é no entanto proporcional à dose por evento calculada por Monte Carlo, para determinação de razões de débito referentes ao mesmo campo de radiação [Kapur et al., 1998]. Os valores encontrados para as razões de débito para os códigos GEANT3 e DPM foram comparadas com valores experimentais obtidos para o acelerador Siemens KD2 – Tabela 5.1. A incerteza introduzida na determinação da dose absoluta para o campo de radiação de referência calculada por Monte Carlo, foi reduzida através da minimização dos desvios quadráticos entre os dados experimentais (OF_{Exp}) e simulação (OF_{MC}) [Libby et al., 1999]:

$$\sum_{i=\ 0\ cm}^{5\ cm} (OF_{Exp} - k \cdot OF_{MC})^2 \tag{5.2}$$

Espessura (cm)	OF_{Exp}	OF^{a}_{GEANT3}	$\Delta_{\ GEANT3}(\%)$	OF^{b}_{DPM}	$\Delta_{\ DPM}(\%)$
0	1.000	1.010	-1.00	0.994	0.60
1	0.979	0.968	-1.17	0.976	0.30
2	0.960	0.957	0.26	0.958	0.19
3	0.934	0.931	0.30	0.939	-0.57
4	0.917	0.917	-0.01	0.923	-0.70
5	0.907	0.904	0.34	0.905	0.16

[a] $k = 1.010$

[b] $k = 0.994$

Tabela 5.1: Razões de débito experimentais e calculadas por GEANT3 e DPM para espessuras da camada de ar de 1–5 cm

Os erros relativos entre as razões de débito experimentais e os valores determinados por simulação são inferiores ou da ordem de 1%, sendo consistentes com resultados encontrados em estudos de aplicação da técnica de Monte Carlo ao cálculo de razões de débito em Radioterapia [Kapur et al., 1998, Zhang et al., 1999]. A taxa de diminuição das razões de débito com a espessura da camada de ar experimental e obtida por Monte Carlo foi determinada por ajuste linear aos valores – Figura 5.6. Para as simulações com o código GEANT3 e DPM a variação foi de 2.0±0.2% cm^{-1} ($\chi^2/ndf = 0.89$) e de 1.8±0.1% cm^{-1} ($\chi^2/ndf = 0.10$) respectivamente, sendo de 1.9±0.1% cm^{-1} ($\chi^2/ndf = 1.01$) para os valores experimentais.

O sistema de cálculo de dose baseado no modelo multi–fontes e no algoritmo DPM e o código GEANT3 demostram descrever correctamente as distribuições de dose experimentais, apresentando uma elevada precisão no cálculo de grandezas

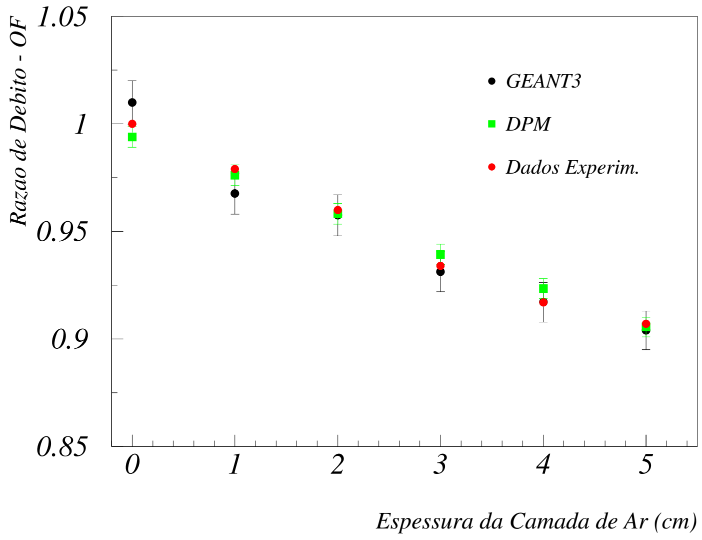


Figura 5.6: Comparação das razões de débito em função da espessura da camada de ar entre os valores experimentais e calculados pelos códigos GEANT3 e DPM

dosimétricas. No entanto, as eficiências no processo de simulação revelam diferenças significativas. O tempo necessário para a obtenção do espaço de fases representativo da configuração para a energia 10 MeV e campo de radiação 10×10 cm^2 e simulação de uma distribuição de dose num *fantoma* homogéneo de água para 1×10^7 eventos (σ=0.3%) com o código GEANT3, foi estimado em 560 000 segundos, para um sistema DIGITAL Alpha 600au com um processador a 600 MHz. Para o sistema de cálculo de dose, a geração do espaço de fases com o modelo multi–fontes para a mesma configuração de feixe e simulação do transporte pelo algoritmo DPM, para a mesma estatística, apresenta um tempo total de aproximadamente 832 segundos, num computador equipado com um processador Pentium IV, a 1.7 GHz[2]. Estes resultados indicam uma redução de aproximadamente duas ordens de grandeza no tempo de execução com o sistema de cálculo rápido de dose relativamente à simulação Monte Carlo "completa" com o código GEANT3, para a mesma precisão. Considerando como clinicamente aceitável uma incerteza

[2]Testes de desempenho entre um sistema Pentium IV a 1.4 GHz (Linux, RH 6.1) e uma unidade DIGITAL Alpha a 600 MHz (Unix, OSF1 V4) indicam que a razão $T_{Alpha}/T_{Pentium}$ encontrada entre os tempos de execução de operações de vírgula flutuante é de 3.77.

estatística de 1–2% [Kawrakow and Fippel, 2000], o tempo de cálculo com o sistema seria de apenas 85–20 segundos sendo necessário simular 1×10^6 e 2.5×10^5 eventos respectivamente. A eficiência computacional associada à elevada precisão no cálculo de dose sugere a sua possível utilização como meio de verificação de sistemas de planeamento comerciais.

Os sistemas de planeamento utilizados actualmente nas unidades de Radioterapia para cálculo de dose com feixes de electrões, apresentam métodos rápidos de cálculo que utilizam aproximações analíticas para a determinação da solução da equação de transporte. Na sua maioria, os sistemas planeamento comerciais apresentam algoritmos do tipo *pencil beam* segundo a implementação proposta por Hogstrom [Hogstrom et al., 1981] ou por Lax *et al* [Ding et al., 1999]. Estes algoritmos assumem que os feixes de electrões produzidos por aceleradores lineares são decomponíveis num conjunto de feixes pontuais monoenergéticos incidentes segundo o eixo de radiação no plano de colimação final, definido pela última componente do aplicador. A reconstrução da distribuição de dose é efectuada a partir da sobreposição da distribuição de dose axial e radial de cada *pencil beam*, calculadas a partir de informação de dosimetria básica específica do acelerador linear e fornecida previamente ao sistema. As dimensões e geometria do campo de radiação, são contabilizadas pela integração de $N \times N$ feixes pontuais que cobrem os limites do aplicador. Os contornos da superfície de irradiação, presença de camadas de ar e heterogeneidades são incorporados através da modificação das distribuições de dose que caracterizam cada *pencil beam*, para a correcta contabilização da absorção, dispersão angular e radial do feixe nos diferentes meios. No modelo de Hogstrom, a dispersão radial, σ_Z^2 do feixe pontual à profundidade Z no *fantoma* é descrita pela teoria gaussiana de Fermi–Eyges, válida no limite de pequenos ângulos para meios semi–infinitos homogéneos. A sua determinação é efectuada pela soma da variância do feixe resultante de processos de dispersão múltipla, $\sigma^2_{MCS,Z}$, com a variância angular inicial, $\sigma^2_{\theta_x}$, projectada à distância $Z + L$, em que L é a distância entre o aplicador e a superfície do *fantoma*, tomando o valor zero na ausência de camadas de ar adicionais:

$$\sigma_Z^2 = \sigma^2_{MCS,Z} + (Z + L)^2 \cdot \sigma^2_{\theta_x} \tag{5.3}$$

O segundo termo permite contabilizar a dispersão radial do feixe de electrões devido à interacção com as diferentes estruturas do acelerador linear, sendo este um parâmetro de ajuste do modelo, determinado experimentalmente para cada energia disponível. A utilização da teoria de Fermi–Eyges para a determinação de $\sigma^2_{MCS,Z}$, não permite incorporar processos inelásticos com produção de partículas secundárias e dispersão elástica a ângulos elevados. A presença destes processos introduz modificações nas distribuições de dose radiais que deixam de apresentar uma dependência funcional gaussiana. Em alguns sistemas de planeamento, o valor de $\sigma_{MCS,Z}$ em função da profundidade, é corrigido por um factor multiplicativo de ajuste empírico, permitindo modificar a dispersão da função de Fermi–Eyges. No entanto, apesar de tais correcções, os sistemas baseados no algoritmo de Hogstrom são potencialmente falíveis mesmo em aplicações simples de cálculo de dose em *fantomas* homogéneos. Uma outra abordagem, utilizada em sistemas de planeamento baseados no modelo de Lax [Andreo, 1991], consiste em modelar distribuições de dose radiais de feixes pontuais por simulação Monte Carlo considerando explicitamente, deste modo, a contribuição das dispersões de elevado ângulo. A optimização destes algoritmos com o intuito de aumentar a eficiência computacional é efectuada através da introdução de aproximações adicionais aos modelos *pencil beam* que podem limitar a precisão de cálculo em determinadas aplicações clínicas [Fippel et al., 1997].

O sistema de planeamento PLATO baseado na teoria de Hogstrom, foi utilizado para calcular distribuições de dose na presença de camadas de ar. Os valores de σ_{θ_x} foram obtidos experimentalmente pelo método descrito por Hogstrom *et al*, através da medição da largura da penumbra, χ, de perfis transversais de dose no ar a diferentes distâncias do aplicador, L [Battum and Huizenga, 1999]:

$$\chi = \sqrt{2\pi} \cdot \sigma_{\theta_x} L \tag{5.4}$$

Os valores determinados foram comparados com as variâncias derivadas de distribuições angulares extraídas dos espaços de fases ao nível do aplicador, obtidos com GEANT3 para as diferentes energias de feixe, por ajuste de uma função gaussiana radial de Fermi–Eyges na região de baixos ângulos – Tabela 5.2.1. Os ajustes das funções gaussianas radiais aos resultados de Monte Carlo, para as energias nominais de 6, 10 e 18 MeV, são apresentados na figura 5.7. Na região de baixos ângulos o ajuste por distribuição de Fermi–Eyges aos resultados de Monte Carlo é adequado. Para elevados ângulos, a distribuição obtida em GEANT3 apresenta "caudas" características da distribuição de Molière, utilizada neste código para

Energia Nominal (MeV)	σ_{θ_x} Hogstrom[a] (rad)	σ_{θ_x} GEANT3 (rad)
6	0.066	0.060 ± 0.003
8	0.054	0.052 ± 0.003
10	0.046	0.044 ± 0.002
12	0.039	0.041 ± 0.002
15	0.032	0.037 ± 0.002
18	0.027	0.035 ± 0.002

[a] Erro estimado em 0.002 rad

Tabela 5.2: Valores da variância angular em função da energia para o acelerador Siemens KD2, calculadas pelo método experimental de Hosgtrom e por simulação Monte Carlo

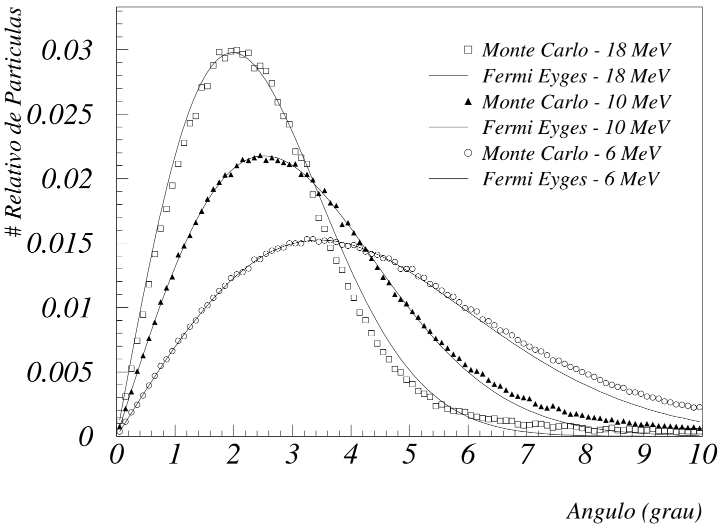


Figura 5.7: Distribuições angulares de electrões calculadas através da teoria de Fermi–Eyges e por simulação com GEANT3 para as energias de feixe de 6, 10 e 18 MeV do acelerador linear Siemens Mevatron KD2

simular processos de dispersão múltipla de electrões. Com o aumento da energia, o ângulo de deflexão médio diminui devido à redução do poder de dispersão linear no ar [Li and Rogers, 1995]. Os valores de σ_{θ_x} derivados por Monte Carlo apresentam desvios inferiores a 8.0 mrad, confirmando os valores previstos pelo método de Hogstrom e a sua validade. Os valores encontrados com este método foram introduzidos no sistema PLATO e posteriormente ajustados, para a obtenção do melhor acordo das distribuições de dose com dados experimentais. Estas foram comparadas com distribuições simuladas pelo sistema de cálculo rápido de dose para camadas de ar de 1.0 e 4.0 cm de espessura anteriormente validadas – Figura 5.8.

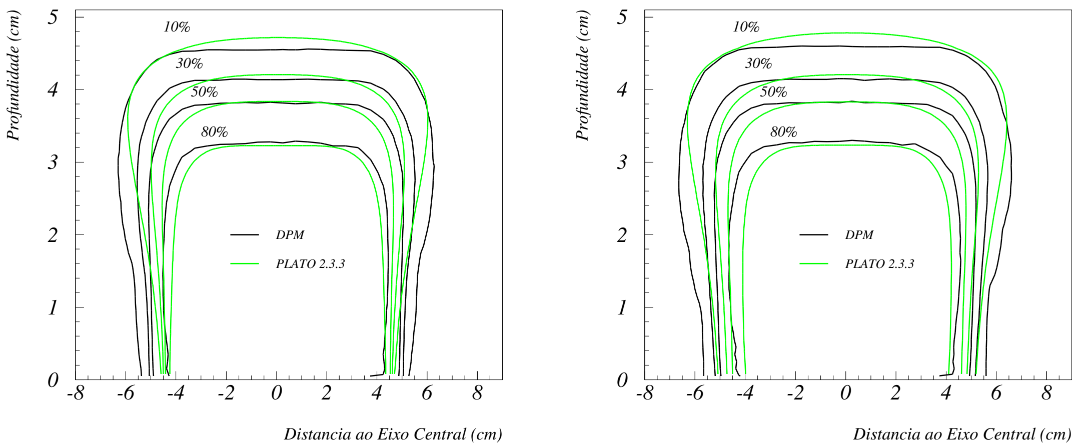


Figura 5.8: Linhas de dose de 80%, 50%, 30% e 10% simuladas com DPM e calculada com PLATO para 1 cm (*esquerda*) e 4 cm (*direita*) de espessura de ar

As linhas de isodose reconstruídas a partir da informação extraída do sistema PLATO apresentam um comportamento discordante em relação aos dados experimentais e linhas de isodose de DPM. Verifica-se uma incorrecta divergência das linhas de isodose mais baixas e previsão de uma menor área de tratamento (linha de 80% de dose). Segundo o eixo central observam-se desvios máximos de aproximadamente 2.0 mm nas linhas de isodose mais baixas, sendo estas discrepâncias amplificadas com o aumento da espessura da camada de ar existente. Desvios laterais de 3.0–5.0 mm subestimando as dimensões da distribuição de radiação tornam-se clinicamente relevantes durante o processo de planeamento de tratamento. A incorrecta descrição da separação das linhas de isodose junto da superfície de irradiação pelo sistema PLATO em tratamentos com feixes de electrões adjacentes tem como consequência a sobrestimação da dose nas regiões de sobreposição dos campos, prevendo o aparecimento de "pontos quentes" de dose não existentes. A escolha da distância óptima para obtenção de um campo superficial de dose homogéneo com base na informação fornecida pelo sistema PLATO conduzirá ao aparecimento de "pontos frios" de dose durante a irradiação. Este exemplo demonstra a necessidade da confirmação por procedimento experimental [Khan et al., 1991], ou através de um método de cálculo de dose alternativo dos resultados fornecidos por sistemas de planeamento.

5.2.2 *Fantomas* Heterogéneos

A presença de heterogeneidades no interior da geometria irradiada ou irregularidades à sua superfície, introduzem modificações nas distribuições de radiação de feixes de electrões. Estas devem-se a fenómenos de absorção e dispersão nos diferentes materiais, dependendo respectivamente da densidade e composição química. Diferenças na absorção do feixe devido à passagem por regiões com densidades distintas, reflectem-se numa maior ou menor penetração em profundidade das linhas de isodose, enquanto que materiais com diferentes números atómicos introduzem perturbações na fluência de electrões adjacentes às regiões de fronteira entre heterogeneidades, levando ao aparecimento de zonas de sobre e subdosagem de pequena extensão [Klevenhagen, 1985]. O sistema de cálculo rápido baseado em Monte Carlo foi utilizado na simulação de *fantomas* heterogéneos ar–água de modo a simular a presença de irregularidades anatómicas à superfície e cavidades de ar no interior da geometria. Os materiais escolhidos apresentam densidades e composições químicas que introduzem alterações consideráveis nas distribuições de dose.

A primeira geometria, apresenta duas heterogeneidades de ar, de dimensões $14.5 \times 32.0 \times 1.0$ cm^3, cada uma colocada entre 0 e 1.0 cm de profundidade, e distantes do eixo central de 1.5 cm. A distribuição de dose foi obtida para um feixe de electrões de 10 MeV e campo $10{\times}10$ cm^2 e comparada com os resultados obtidos por simulação Monte Carlo com o código GEANT3, a partir do espaço de fases gerado pelo modelo multi–fontes – Figura 5.9. Na região central do *fantoma* o feixe de electrões é mais absorvido relativamente às regiões laterais de ar. A menor absorção e perda de energia do feixe devido à baixa densidade do ar, conduz a

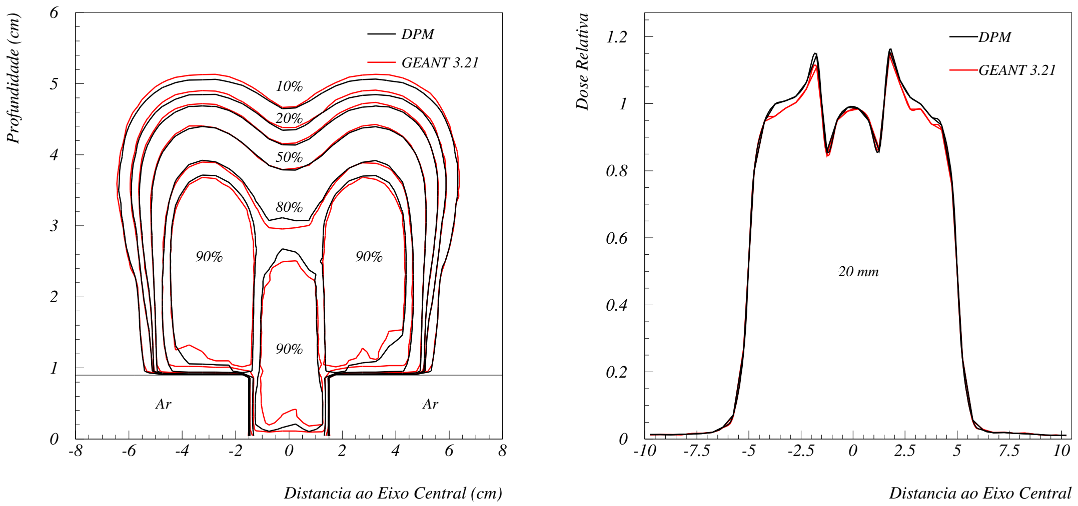


Figura 5.9: Linhas de isodose de GEANT3 (2×10^6 eventos simulados) e DPM (1×10^7 eventos simulados) (*esquerda*) e perfil transversal obtido a 20 mm de profundidade no *fantoma* (*direita*)

uma deslocação das linhas de isodose para profundidades mais elevadas, quando comparado com os valores de dose segundo o eixo central. Nesta geometria, a presença de um bloco de água à superfície na região central do campo de radiação, contribui com um maior número de electrões dispersos para a fluência lateral de electrões. Como a dose é proporcional à fluência, surgem regiões de sobredosagem laterais facilmente identificadas no perfil transversal extraído à profundidade de 20 mm. A subdosagem encontrada, a 1.5 cm e -1.5 cm do eixo central, corresponde à região de fronteira e deve-se à presença de um défice de electrões na região central originado pelos processos de dispersão. Os resultados obtidos com as simulações de GEANT3 e DPM apresentam um bom acordo nas distribuições de dose, prevendo de igual forma os efeitos de absorção e dispersão na presença de heterogeneidades. A simulação com o código GEANT3 foi efectuada somente para 2×10^6 eventos, o que justifica as elevadas flutuações estatísticas observadas na reconstrução das linhas de isodoses e no perfil transversal, tendo sido necessário um tempo de CPU (DIGITAL Alpha) de aproximadamente 86 400 segundos. Com o sistema de cálculo baseado no algoritmo DPM foram simulados 1×10^7 eventos em apenas 852 segundos (Pentium IV), com uma incerteza estatística de 0.3%.

A geometria considerada para a simulação da cavidade de ar foi construida com a inserção de um bloco de ar, de dimensões $16.0 \times 32.0 \times 1.0$ cm^3 a 1.0 cm de profundidade num *fantoma* homogéneo de água. A distribuição tridimensional de dose foi obtida com o código DPM, tendo sido reconstruídas as linhas de dose num plano coincidente com o eixo central de radiação, e extraído um perfil transversal a 15 mm de profundidade – Figura 5.10.

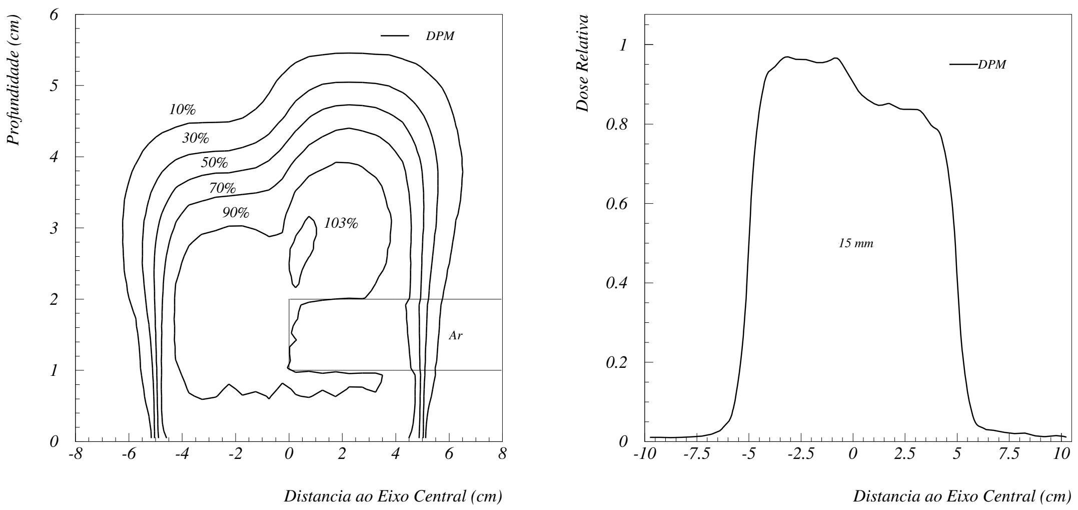


Figura 5.10: Linhas de isodose (*esquerda*) e perfil transversal a 15 mm de profundidade (*direita*) obtidos por simulação com o algoritmo DPM

Esta geometria evidência igualmente os fenómenos de absorção e dispersão do feixe que conduzem à deformação espacial das linhas de isodose. Ao atravessar a cavidade de ar, os electrões perdem menos energia, atingindo um maior alcance em profundidade no *fantoma*, observando-se que a linha de 50% de dose, se desloca de 1.0 cm, provocando uma assimetria do campo de radiação. O efeito de menor absorção dentro da heterogeneidade pode ser observado no perfil transversal de dose entre 0 cm e 3.5 cm com uma diminuição na dose de aproximadamente 10–15%. Devido à soma de contribuições laterais por fenómenos de dispersão no meio envolvente (água), com a fluência proveniente da passagem do feixe pela cavidade de ar, surge uma região irregular de sobredosagem contida pela linha de 103% de dose após a cavidade de ar. O tempo de cálculo necessário para esta simulação foi de 840 segundos para 1×10^7 eventos com 0.3% de incerteza estatística, semelhante ao necessário para simulação do *fantoma* de superfície irregular. Este tipo de *fantomas*, embora apresentem geometrias relativamente simples, representam um desafio para os algoritmos de cálculo de dose dos actuais sistemas de planeamento comerciais. Embora a sua avaliação nestas circunstâncias específicas não se tenha realizado no âmbito deste trabalho, estudos comparativos da precisão no cálculo de dose destes sistemas foram efectuados por outros autores [Ding et al., 1999, Fippel et al., 1997]. Estes estudos demonstram a incapacidade dos algoritmos do tipo *pencil beams* preverem correctamente a dose na vizinhança de regiões heterogéneas, levando na maioria dos planeamentos ao aparecimento de comportamentos de subestimação (implementação de Lax) ou sobrestimação (implementação de Hogstrom) da dose real [Williams and Thwaites, 2000].

5.2.3 Campos Irregulares

Em Radioterapia com feixes de electrões, é frequente a utilização de blocos de colimação adicionais de chumbo ou *cerrobend* moldados de acordo com a especificação de cada tratamento. Estes blocos, permitem uma delimitação suplementar do campo de radiação ao nível do plano de incidência, construidos com uma espessura suficiente de chumbo ou *cerrobend* capaz de absorver parcialmente o feixe. A aplicabilidade do sistema de cálculo desenvolvido para a obtenção de distribuições de dose na presença de um bloco de colimação adicional foi efectuada num exercício conceptual, que consistiu na simulação de um campo de radiação irregular em forma de *borboleta* – Figura 5.11*esquerda*. A codificação da geometria, *fantoma* de água, aplicador e *cutout* de chumbo com 1.0 cm de espessura foi efectuada no código DPM, através do preenchimento de *voxels*. Este esquema de implementação da geometria pode ser extendido de modo a permitir a codificação de blocos por transferência directa de informação CAD (*Computer Aided Designed*) proveniente dos sistemas semi–automáticos de moldagem existentes nas unidades de Radioterapia. O tempo necessário ao cálculo da distribuição de dose para um campo de 10×10 cm^2 e energia de 10 MeV – Figura 5.11 *direita* – foi de 1800 (180) segundos para uma incerteza estatística de 0.3% (1%). Os tempos de cálculo de códigos de transporte *generalistas* para a simulação de campos de radiação irregulares definidos por *cutouts* são superiores, atingindo uma diferença de quase duas ordens de grandeza [Li et al., 2000].

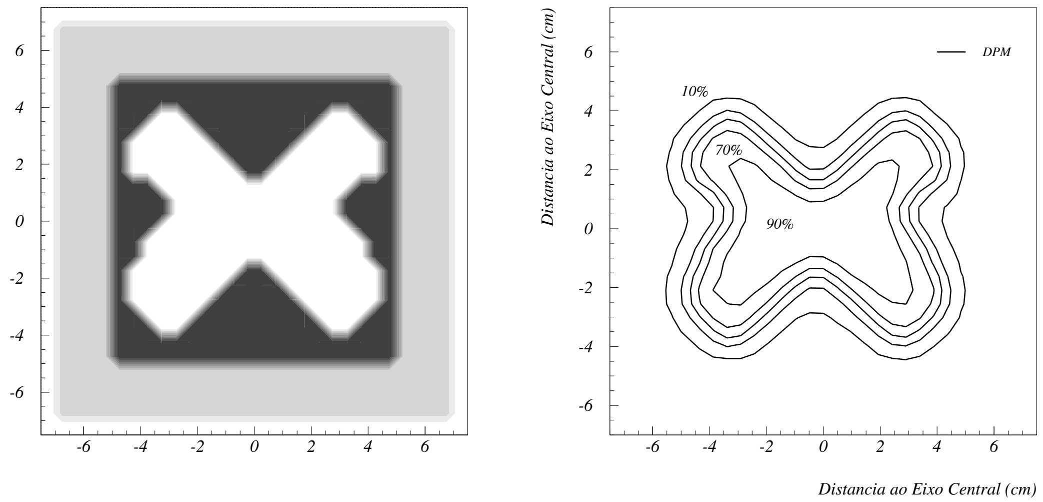


Figura 5.11: Representação do bloco de colimação de chumbo inserido na última componente do aplicador (*esquerda*). Distribuição de dose, segundo o plano perpendicular à direcção de incidência do feixe, a 2 cm de profundidade simulada pelo sistema de cálculo (*direita*)

5.3 Avaliação e Perspectivas de Utilização

Os tempos de execução do sistema de cálculo rápido de dose, envolvidos nas aplicações dosimétricas anteriormente descritas, são apresentados na tabela 5.3. Dado que o tempo de geração de eventos através do modelo multi–fontes é igual para os diversos *fantomas*, é possível afirmar que o tempo de execução é praticamente independente da complexidade da geometria. A excepção surge na simulação de blocos de colimação adicionais, devido à elevada produção de electrões e fotões secundários que necessitam de ser transportados pelo código DPM.

Geometria	$T_{\sigma\approx 1\%}$ (s)	$T_{\sigma\approx 0.3\%}$ (s)
Homogéneo	83.2	832.0
Irregularidade	85.2	852.0
Cavidade Ar	84.0	840.0
Cutout	180.0	1800.0

Tabela 5.3: Tempos de execução do sistema de cálculo de dose para a simulação das diferentes geometrias utilizadas nas aplicações dosimétricas com incertezas estatísticas de $\sigma \approx 1\%$ e $\sigma \approx 0.3\%$

Ganhos adicionais de eficiência podem ser atingidos através de técnicas de redução de variância, que permitem evitar a simulação de partículas que não contribuam significativamente para as distribuições de dose. Estas incluem a opção de não simular fotões produzidos no *cutout*, que contribuem somente com 0.5% da dose total do campo de radiação, assim como a definição de uma margem limítrofe do campo na qual são produzidas partículas dispersas que contribuem para a dose superficial depositada e fora da qual o transporte das partículas não é efectuado. Tais aproximações permitem uma redução do tempo de CPU por um factor dois [Mubata et al., 2001]. O recurso a estas metodologias no sistema de cálculo desenvolvido, permitiria reduzir o tempo computacional, atingindo os níveis verificados nas restantes aplicações.

Tendo como objectivo avaliar a velocidade de execução do sistema em função da energia do feixe incidente e sua aplicabilidade a cálculo de dose em geometrias reais, simulou-se a interacção de feixes de electrões com uma geometria de referência, constituída por um *fantoma* em que cada *voxel* é preenchido aleatoriamente com um de quatro materiais: água (ρ=1.00 gcm^{-3}), alumínio (ρ=2.70 gcm^{-3}), osso cortical (ρ=1.85 gcm^{-3}) e pulmão (ρ=0.30 gcm^{-3}). Esta geometria apresenta um elevado grau de heterogeneidade pelo que os tempos de cálculos são extrapoláveis para futuras simulações de distribuições de dose em geometrias descritas por imagens de tomografia axial computadorizada (TAC) [Rogers and Mohan, 2001]. O número e dimensões dos *voxels* que compôem esta geometria, são idênticos aos utilizadas no cálculo de dose nos *fantomas* homogéneos e heterogéneos. O número de eventos gerados foi seleccionado em função da energia de feixe, considerando-se a simulação concluída quando a incerteza estatística atingiu um valor igual a 1% no *voxel* com a dose máxima sobre o eixo central de radiação. Os tempos de cálculo, T_{Norm}, estão normalizados ao tempo de CPU de 65.22 segundos referentes ao feixe de energia 10 MeV, para o campo de 10×10 cm^2 do acelerador Siemens KD2 gerado pelo modelo multi–fontes – Tabela 5.4. Este tempo é inferior ao necessário para obter uma distribuição de dose num *fantoma* homogéneo de água para a mesma configuração e incerteza estatística. Tal é justificado pelo facto de 50% dos *voxels* terem sido preenchidos com materiais de densidade superior à da água (alumínio e osso cortical) nos quais os electrões depositam mais rapidamente a sua energia penetrando menos na geometria. Apesar do aumento da probabilidade de produção de partículas secundárias com a densidade do meio, o número de *voxels* atravessa-

Energia Nominal (MeV)	T_{Norm} $\sigma \approx 1\%$
6	0.97
8	0.99
10	1.00
12	1.05
15	1.29
18	1.34

Tabela 5.4: Tempo de cálculo para o sistema de cálculo de dose DPM em função da energia, no *fantoma* de referência

dos pelos electrões é menor, o que reduz o tempo de CPU gasto em chamadas às subrotinas de transporte [Sempau et al., 2000]. Dos resultados obtidos verificou-se que o tempo de cálculo é practicamente independente da complexidade da geometria, aumentando no entanto com a energia de feixe. Esta variação deve-se a dois factores distintos. Com o aumento da energia o número de fotões contaminantes presentes no feixe é superior. Para energias de 15 MeV e 18 MeV cerca de 82% das partículas amostradas pelo modelo multi-fontes são fotões, enquanto que para a energia de referência de 10 MeV esta percentagem desce para 60% – Capítulo 4. Como os fotões apresentam elevados livres percursos médios, podendo atravessar a geometria sem depositar energia, o seu transporte penaliza a eficiência do cálculo, por comparação com um feixe que só contenha electrões. O segundo factor deve-se ao aumento do número de electrões secundários produzidos no *fantoma* com a energia, requerendo um maior tempo computacional para transporte através dos *voxels* e cálculo da energia depositada. Numa futura optimização deste sistema, a dependência do tempo de cálculo com a energia do feixe pode ser reduzida, fornecendo ao utilizador a opção de desligar o processo de amostragem de fotões primários no modelo multi–fontes durante a fase interactiva do planeamento. Tal permitirá a simulação de distribuições de dose na região de interesse clínico, sendo a contribuição para a dose depositada pela componente contaminante de fotões, adicionada numa fase posterior.

A evolução do tempo de CPU necessário para cálculo de dose, ao longo deste trabalho, encontra-se representada na figura 5.12[3].

[3] Os valores apresentados para as simulações com GEANT3 são valores extrapolados para um sistema Pentium IV a 1.7 GHz

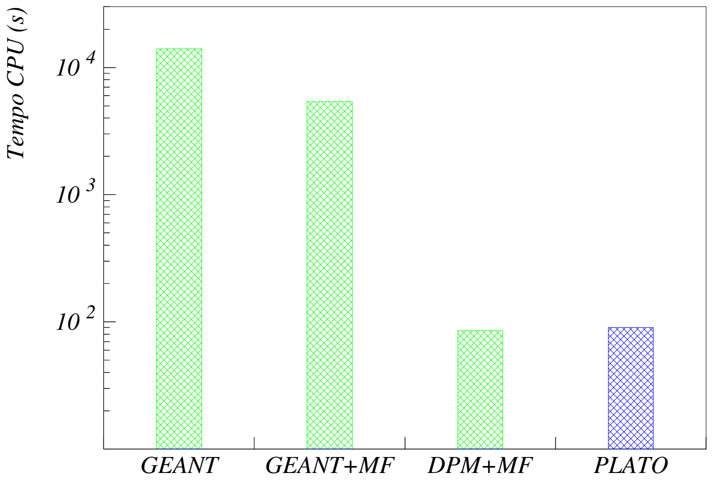


Figura 5.12: Evolução de valores médios de tempos de cálculo para GEANT3, GEANT3 acoplado ao modelo multi–fontes e DPM acoplado ao modelo multi–fontes. Para o sistema PLATO é indicado um valor típico para cálculo de dose num *fantoma* homogéneo

O desenvolvimento do modelo multi–fontes e a sua implementação em GEANT3 – Capítulo 4 – permitiu um ganho de eficiência por um factor três, evitando a necessidade da simulação explícita do transporte do feixe pela geometria do acelerador linear – Capítulo 3. Com a utilização do código GEANT3 para a simulação de *fantomas*, reduções no tempo de CPU só seriam possíveis através da aplicação de métodos de redução de variância [Bielajew, 2000]. Estas técnicas permitem manipular os esquemas de transporte de radiação, obtendo-se resultados com a mesma incerteza estatística, em tempos de cálculo inferiores. O algoritmo de Monte Carlo DPM, para aplicações à Radioterapia, acoplado ao modelo multi–fontes, permitiu numa fase posterior desenvolver um sistema rápido de cálculo de dose, com um ganho de eficiência de aproximadamente duas ordens de grandeza quando comparado com a mesma abordagem baseada em GEANT3.

O sistema de cálculo de dose desenvolvido apresenta uma precisão comparável a códigos de Monte Carlo *generalistas* e tempos de execução rápidos em computadores de baixo custo. Estas características tornam este sistema competitivo com as unidades de planeamento comerciais baseadas em algoritmos do tipo *pencil beam*, actualmente existentes nas unidades de Radioterapia. O desenvolvimento de uma interface gráfica por forma a facilitar o processo de ajuste dos parâmetros do modelo multi–fontes e selecção de distribuições de dose, tornará possivel a sua utilização sistemática para obtenção de informação de dosimetria básica para feixes de electrões. A realização de avaliações rigorosas por forma a conhecer as suas limitações no cálculo de distribuições de dose em geometrias complexas, contribuirá para a projecção de um sistema de verificação de planeamento de tratamento reais baseado em simulação Monte Carlo em meios clínicos.

Referências

[Andreo, 1991] Andreo, P. (1991). Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Phys. Med. Biol.*, 36(7):861–920. Topical Review.

[Battum and Huizenga, 1999] Battum, L. J. and Huizenga, H. (1999). In the initial angular variances of clinical electron beams. *Phys. Med. Biol.*, 44:2803–20.

[Bielajew, 2000] Bielajew, A. F. (2000). *Fundamentals of the Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport*, chapter 17, Variance reduction techniques, pages 275–298. The University of Michigan.

[Brun et al., 2000] Brun, R., Couet, O., Cremel, N. L., Vandomi, C., and Zanarini, P. (2000). *PAW - Physics Analysis Workstation*. CERN – European Organization for Nuclear Research. CERN Program Library Long Writeup Q121.

[Ding et al., 1999] Ding, G. X., Cygler, J. E., Zhang, G. G., and Yu, M. K. (1999). Evaluation of a commercial three–dimensional electron beam treatment planning system. *Med. Phys.*, 26(12).

[Fippel et al., 1997] Fippel, M., Kawrakow, I., and Friedrich, K. (1997). Electron beam dose calculations with the VMC algorithm and the verification data of the NCI working group. *Phys. Med. Biol.*, 42:501–20.

[Hogstrom et al., 1981] Hogstrom, K. R., Mills, M. D., and Almond, P. R. (1981). Electron beam dose calculations. *Phys. Med. Biol.*, 26(3):445–59.

[Kapur et al., 1998] Kapur, A., Ma, C.-M., Mok, E. C., Findley, D., and Boyer, A. (1998). Monte Carlo calculations of electron beam output factors for a medical linear accelerator. *Phys. Med. Biol.*, 43:3479–94.

[Kawrakow and Fippel, 2000] Kawrakow, I. and Fippel, M. (2000). Investigation of variance reduction techniques for Monte Carlo photon dose calculation using XVMC. *Phys. Med. Biol.*, 45:2163–83.

[Khan et al., 1991] Khan, F. M., Doppke, K. P., Hogstrom, K. R., Kutcher, G. J., Nath, R., Prasad, S. C., Purdy, J. A., Rozenfeld, M., and Werner, B. L. (1991). Clinical electron-beam dosimetry: Report of AAPM Radiation Therapy Committee Task Group No. 25. *Med. Phys.*, 18(1):73–109.

[Klevenhagen, 1985] Klevenhagen, S. C. (1985). *Physics of Electron Beam Therapy*, chapter 5, Beam distribution in the patient, pages 106–36. Adam Hilher Ltd.

[Li et al., 2000] Li, J. S., Pawlicki, T., Deng, J., Jiang, S. B., Mok, E., and Ma, C.-M. (2000). Validation of a Monte Carlo dose calculation tool for radiotherapy treatment planning. *Phys. Med. Biol.*, 45:2969–85.

[Li and Rogers, 1995] Li, X. A. and Rogers, D. W. O. (1995). Electron mass scattering powers: Monte Carlo and analytical calculations. *Med. Phys.*, 22:791–8.

[Libby et al., 1999] Libby, B., Siebers, J., and Mohan, R. (1999). Validation of Monte Carlo generated phase-space descriptions of medical linear accelerators. *Med. Phys.*, 26(8):1476–83.

[Ma and Jiang, 1999] Ma, C.-M. and Jiang, S. B. (1999). Monte Carlo modelling of electron beams from medical accelerators. *Phys. Med. Biol*, 44:R157–89. Topical Review.

[Mubata et al., 2001] Mubata, C. D., Verhaegen, F., and Nahum, A. E. (2001). Speeding up Monte Carlo simulation of electron cut–outs in treatment planning. In Schlegal and Bortfeld, editors, *Proc. 13th Int. Conf. on the Use of Computers in Radiation Therapy, Heidelberg, Germany*, pages 440–2. Springer–Verlag.

[Rodrigues et al., 2001] Rodrigues, P., Alves, C., Chaves, A., Lopes, M. C., Oliveira, C., Peralta, L., and Trindade, A. (2001). Treatment planning verification by means of a Monte Carlo dose calculation engine. In Overgaard, J., editor, *Proc. 6th Biennial ESTRO Meeting on Physics in Clinical Radiotherapy, Sevilla, Spain, Rad. and Onc.*, volume 51(Supplement 1), page S27. ESTRO –

European Society for Therapeutic Radiology and Oncology, Elsevier Science Inc. Abstract 63.

[Rogers and Mohan, 2001] Rogers, D. W. O. and Mohan, R. (2001). Questions for comparison of clinical Monte Carlo codes. In Schlegal and Bortfeld, editors, *Proc. 13th Int. Conf. on the Use of Computers in Radiation Therapy, Heidelberg, Germany*. Springer–Verlag.

[Sempau et al., 2000] Sempau, J., Wilderman, S. J., and Bielajew, A. F. (2000). DPM, a fast accurate Monte Carlo code optimized for photon and electron radiotherapy treatment planning dose calculations. *Phys. Med. Biol.*, 45:2263–91.

[Trindade et al., 2001] Trindade, A., Alves, C., Chaves, A., Lopes, M. C., Oliveira, C., Peralta, L., and Rodrigues, P. (2001). Influence of air gaps on electron dose calculations. In Overgaard, J., editor, *Proc. 6th Biennial ESTRO Meeting on Physics in Clinical Radiotherapy, Sevilla, Spain, Rad. and Onc.*, volume 61(Supplement 1), page S39. ESTRO – European Society for Therapeutic Radiology and Oncology, Elsevier Science Inc. Abstract 100.

[Williams and Thwaites, 2000] Williams, J. R. and Thwaites, D. I., editors (2000). *Radiotherapy Physics*, chapter 10, Electron beam treatment–planning techniques, pages 1–5. Oxford University Press, second edition.

[Zhang et al., 1999] Zhang, G. G., Rogers, D. W. O., Cygler, J. E., and Mackie, T. R. (1999). Monte Carlo investigation of electron beam output factors versus size of square cutout. *Med. Phys.*, 26(5):743–50.

Conclusões

O estudo da optimização do processo de simulação Monte Carlo de feixes de electrões produzidos por aceleradores lineares clínicos para aplicações de cálculo de dose em Radioterapia, foi elaborado em duas fases distintas.

Na primeira fase o principal objectivo compreendeu a simulação do acelerador linear Siemens Mevatron KD2 em modo electrões para uma configuração de feixe de energia 10 MeV e campo de radiação de 10×10 cm^2, sendo efectuada a sua caracterização ao longo da cabeça de tratamento. Distribuições de fluência e espectros de energia de electrões e da componente contaminante de fotões foram geradas e analisadas em níveis de caracterização pré–estabelecidos. As simulações foram realizadas com dois códigos de Monte Carlo independentes, EGS4 e GEANT3, o que permitiu, paralelamente à caracterização do feixe, avaliar a influência dos diferentes modelos físicos e aproximações cometidas por cada algorítmo de simulação nos resultados obtidos. Neste estudo destacam-se as diferenças encontradas na determinação de algumas grandezas, nomeadamente nos espectros de energia e distribuições de fluência e energia média de fotões, tendo sido correlacionadas com diferenças identificadas nas secções eficazes de *bremsstrahlung*. No entanto, estas discrepâncias não se revelaram significativas no acordo a menos de 2% dos dados experimentais encontrados nas distribuições de dose calculadas pelos dois códigos em *fantomas* homogéneos. Estes desvios entre 2% e 3.5% observados nas curvas de dose em profundidade na região de alcance efectivo, poderão ser reduzidos introduzindo modelos de fontes primárias de electrões não pontuais e monoenergéticos. Numa avaliação final, estes resultados permitem concluir que o EGS4 e GEANT3 são igualmente capazes de gerar espaços de fases representativos dos feixes de electrões para cálculo de dose, ilustrando as potencialidades do método de Monte Carlo como uma técnica precisa para obtenção de informação realista sobre o processo de produção de feixes de radiação de elevada intensidade de outro modo inacessíveis devido às limitações dos dispositivos experimentais. O seu conhecimento detalhado permite a obtenção de informação capaz de aumentar a precisão das medições obtidas em dosimetria básica e clínica. No entanto, cada espaço de fases é em princípio único, podendo variar entre aceleradores lineares do mesmo modelo devido às características do feixe primário de electrões à saída da estructura de aceleração ou alterar-se devido a pequenas modificações introduzidas durante a manutenção técnica do acelerador. Um exemplo paradigmático é a substituição do aplicador por um outro de modelo diferente, que se sabe por simulação Monte Carlo e medições experimentais, poder alterar a fluência do feixe de electrões e as distribuições de dose. Nestas condições novos espaços de fases têm de ser simulados, elevando o tempo de cálculo a níveis incompatíveis com as capacidades de centros de Radioterapia de pequena ou média dimensão.

Uma alternativa ao processo de simulação extensiva de cada configuração de feixe de tratamento foi abordada na segunda fase deste estudo, com o intuito de diminuir o tempo de execução do processo de simulação e cálculo de dose mantendo, no entanto, o mesmo grau de precisão. A técnica desenvolvida compreende a manipulação da informação contida nos espaços de fases que descrevem o feixe de electrões de referência do acelerador linear Siemens KD2 de modo a determinar a influência de cada componente da geometria constituinte do acelerador modelado, para o espaço de fases e a sua importância dosimétrica. As principais componentes ou sub–fontes foram selecionadas e caracterizadas por distribuições de energia, fluências e intensidades constituindo a *representação* do feixe no âmbito de um modelo multi–fontes. Este, através de um processo simples de re–amostragem das distribuições que caracterizam cada sub–fonte, possibilita a *reconstrução/geração* de espaços de fases dosimetricamente equivalentes à simulação "completa" do acelerador. A *reconstrução/geração* é efectuada durante o cálculo de dose eliminando a necessidade de armazenamento dos ficheiros espaço de fases de elevadas dimensões. As distribuições de dose simuladas a partir dos espaços de fases reconstruidos com o modelo multi–fontes coincidem a menos de 2% com as medidas experimentais num *fantoma* homogéneo de água.

A flexibilidade deste modelo reside na utilização de factores de escala e/ou de correcção (espaciais, em energia e intensidade) facilmente derivados a partir de informação dosimétrica básica para a reconstrução rápida, em aproximadamente 1 minuto, obtendo-se uma redução significativa no tempo computacional das várias configurações do acelerador linear de referência. A base conceptual do modelo permite a sua extrapolação para a simulação de feixes de electrões de outros aceleradores lineares sem necessidade de informação especifica sobre a sua geometria. Recorrendo a este modelo foram reconstruidos feixes de electrões produzidos pelos aceleradores Siemens Mevatron MD2 e GE Saturne–42 tendo-se encontrado um bom acordo com dados experimentais. Possíveis optimizações do modelo relativas ao número de sub–fontes e respectivas geometrias poderão ser estudadas para simplificação do processo de amostragem e estabelecimento do número mínimo de sub–fontes necessárias à modelação de um feixe clínico de radiação. A construção do modelo multi–fontes e os resultados demonstrados constituiram o ponto de partida para o desenvolvimento de um sistema de cálculo rápido de dose, baseado no método de Monte Carlo.

A escolha de um sistema de Monte Carlo optimizado para aplicações de cálculo de dose em Radioterapia em geometrias heterogéneas, DPM, acoplado ao modelo de reconstrução foi validado com dados experimentais tendo sido obtido um acordo a menos de 2% com um tempo de execução de apenas 83 segundos num computador Pentium IV para uma incerteza estatística de 1%. A avaliação do sistema em geometrias heterogéneas revelou um bom acordo com o sistema generalista GEANT (com um tempo de cálculo de 86×10^3 segundos) requerendo somente 85 segundos para uma incerteza estatística de 1%. Dos resultados obtidos nas várias aplicações dosimétricas, foi possivel concluir que o sistema apresenta uma precisão superior quando comparado com um sistema de planeamento de tratamento em Radioterapia disponível comercialmente e, de uma forma geral um comportamento fiável para aplicações de cálculo de dose em *fantomas* homogéneos e heteogéneos simples e na determinação de grandezas dosimétricas. Aplicações adicionais, incluindo geometrias TAC virtuais, para perspectivas futuras de utilização do sistema de cálculo rápido de dose demonstraram as suas potencialidades na rotina clínica como meio de verificação de sistemas de planeamento convencionais.

A projecção e implementação de um sistema de planeamento completo baseado num algorítmo de Monte Carlo *dedicado*, visando a procura de uma maior precisão no cálculo de dose com a finalidade de optimizar a dose administrada, requer estudos complementares abordando essencialmente dois aspectos. No contexto da modelação dos feixes de radiação é necessário a inclusão de um modelo multi–fontes para reconstrução de feixes de fotões bem como a execução de planeamentos realistas e sua validação por comparação com dados de dosimetria clínica e de sistemas *generalistas* de Monte Carlo. Sem o recurso a esquemas de optimização, estima-se que ainda seriam necessários 10 anos para ser possivel efectuar um planeamento de tratamento em Radioterapia interactivo por simulação Monte Carlo, em tempos da ordem do minuto.

adenda