

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA E
INFORMÁTICA INDUSTRIAL

KAROLINE AKEMI SATO

**SIMULAÇÃO DOS PERFIS DE ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE
TECIDOS MAMÁRIOS E MATERIAIS EQUIVALENTES POR CÓDIGO
MONTE CARLO**

DISSERTAÇÃO

CURITIBA
2018

KAROLINE AKEMI SATO

**SIMULAÇÃO DOS PERFIS DE ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE
TECIDOS MAMÁRIOS E MATERIAIS EQUIVALENTES POR CÓDIGO
MONTE CARLO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, como requisito parcial para obtenção do grau de “Mestre em Engenharia Elétrica e Informática Industrial”. Área de Concentração: Engenharia Biomédica.

Orientador: Prof. Dr. André Luiz Coelho Conceição

Co-orientador: Prof. Dr. Marcelo Antoniassi

CURITIBA
2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

- S253s
2018
- Sato, Karoline Akemi
Simulação dos perfis de espalhamento elástico de tecidos mamários e materiais equivalentes por código Monte Carlo / Karoline Akemi Sato.-- 2018.
195 p. : il. ; 30 cm
- Disponível também via World Wide Web
Texto em português com resumo em inglês
Dissertação (Mestrado) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial, Curitiba, 2018
Bibliografia: p. 133-144
1. Simulação (Computadores). 2. Diagnóstico radioscópico. 3. Espalhamento elástico. 4. Monte Carlo, Método de. 5. Raios X. 6. Diagnóstico por imagem. 7. Mamas – Imagem. 8. Engenharia biomédica. 9. Engenharia elétrica – Dissertações. I. Conceição, André Luiz Coelho. II. Antoniassi, Marcelo. III. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial. IV. Título.

CDD: Ed. 23 – 621.3

Biblioteca Central da UTFPR, Câmpus Curitiba
Bibliotecário: Adriano Lopes CRB9/1429

TERMO DE APROVAÇÃO DE DISSERTAÇÃO Nº 784

A Dissertação de Mestrado intitulada “**Simulação dos Perfis de Espalhamento Elástico de Tecidos Mamários e Materiais Equivalentes por Código Monte Carlo**” defendida em sessão pública pelo(a) candidato(a) **Karoline Akemi Sato**, no dia 23 de fevereiro de 2018, foi julgada para a obtenção do título de Mestre em Ciências, área de concentração Engenharia Biomédica, e aprovada em sua forma final, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial.

BANCA EXAMINADORA:

Prof(a). Dr(a). André Luiz Coelho Conceição - Presidente – (UTFPR)

Prof(a). Dr(a). Pedro Zambianchi Junior – (UTFPR)

Prof(a). Dr(a). Vitoldo Swinka Filho – (UFPR)

Prof(a). Dr(a). Walmor Cardoso Godoi – (UTFPR)

A via original deste documento encontra-se arquivada na Secretaria do Programa, contendo a assinatura da Coordenação após a entrega da versão corrigida do trabalho.

Curitiba, 23 de fevereiro de 2018.

Dedico este trabalho à minha família, aos alunos e amigos,
ao corpo docente da Universidade Tecnológica Federal do Paraná,
de modo especial àqueles que participaram efetivamente
da minha formação pessoal e profissional.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela vida, proteção e direção.
Sem Ele nada seria possível!

Aos meus pais, por seus exemplos e ensinamentos
e pelos valiosos incentivos aos estudos!

À minha irmã, “my little sister”, que me dá várias dicas!

A todos os professores da UTFPR, em especial:
ao professor orientador Dr. André Luiz Coelho Conceição
por todo auxílio, atenção, dedicação e paciência para a orientação deste trabalho;
e ao professor Dr. Marcelo Antoniassi por toda a sua colaboração.

Ao meu grande companheiro de equipe,
Caio Gerwandsznajder Nunes Silva, por todo apoio, ajuda e motivação.
E por toda sua tranquilidade nas mais diversas circunstâncias!

Às minhas amigas
Alessandra Harumi Lopes Kikuchi e Bruna Fortunato,
por todo incentivo e conversas!

À Dra. Karla Viveros Uriarte
pelo auxílio com o entendimento dos temas relacionados a área da saúde.

Aos envolvidos com o LIERX, em especial:

à Liza Macedo Lopes, ao Matheus Macedo Lopes
e a Alana Caroline França Fagundes,
incluindo suas famílias,
que me auxiliaram em várias situações relacionadas ao mestrado!

Também ao João Frederico Ritter Benvenuti,
ao João Vitor Rodrigues da Cruz e à Marcelle Reis Pires,
que me auxiliaram com os *softwares*;

e à Aline Maíza Jubainski, à Luciula de Almeida
e ao Guilherme Gomes da Silva
que me auxiliaram com algumas questões da parte teórica.

A todos os demais amigos e colegas da UTFPR, em especial:
à Lucilene Yumi Ishida, à Graziela Giacometti Fermino Buffon,
ao Jônatas Daniel de Oliveira Silvério, ao Fernando Mamoru Tanaka Fujisawa,
ao Lucas Inocêncio de Matos e à Fernanda D'Amico Silva.

Também à CAPES, pelo auxílio financeiro.

Enfim, a todos que, de alguma forma,
colaboraram para a execução desta dissertação.

**“Se tiver o dom de servir, sirva com dedicação.
Se for mestre, ensine bem.”**

Romanos 12:7

Bíblia (Nova Versão Transformadora)

RESUMO

SATO, K. A. Simulação dos perfis de espalhamento elástico de tecidos mamários e materiais equivalentes por código Monte Carlo. 2018. 195 p. (Mestrado em Engenharia Elétrica e Informática Industrial) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2018.

Em radiodiagnósticos, tais como em mamografias, é comum considerar que a radiação espalhada seja um problema, pois degrada o contraste da imagem. Porém, estudos recentes mostraram que é possível identificar a presença de anormalidades num tecido biológico, a partir da distribuição angular dos fótons espalhados (perfil de espalhamento), que fornecem as informações detalhadas sobre a composição estrutural do tecido. No entanto, estudos de base deste tipo tem-se utilizado de simulação computacional, devido à dificuldades e limitações, tanto na obtenção, armazenamento e manipulação das amostras, quanto na instrumentação experimental, além de questões éticas envolvidas. Neste trabalho, foram simulados os perfis de espalhamento elástico, na região de ângulos intermediários, denominado WAXS (do inglês, *Wide Angle X-ray Scattering*), de tecidos mamários normais e patológicos, bem como de materiais equivalentes a tais tecidos, por fornecer informações sobre as estruturas responsáveis pelo espalhamento em nível molecular. Para a simulação computacional dos perfis de espalhamento foi utilizado o código Monte Carlo, com o auxílio do *software* MC-GPU. Seu diferencial em relação a outros códigos para simulação de perfis na região de WAXS é a possibilidade de inclusão dos fatores de forma medidos experimentalmente, que englobam a Função de Interferência Molecular, ao invés apenas dos fatores de forma calculados utilizando o Modelo Atômico Independente. Foram construídos dois *phantoms* virtuais em forma cilíndrica, com inserções cilíndricas internas contendo os seguintes materiais: tecido adiposo, tecido glandular, água, dimetilformamida, etanol, glicerol e nylon, compondo 27 combinações, com simulações específicas em cada uma. Estes materiais foram escolhidos por apresentar características de atenuação similares às dos tecidos mamários normais e patológicos na energia utilizada. Foi utilizado um feixe de fótons monoenergético ($K\alpha$ -Cu = 8,54 keV) e um detector bidimensional. Os padrões de espalhamento obtidos foram integrados para obtenção dos perfis de espalhamento. Os resultados com os *phantoms* virtuais foram muito semelhantes aos reportados na

literatura para cada um dos materiais puros inseridos nos *phantoms*. Assim, este trabalho demonstrou a possibilidade de inclusão dos fatores de forma experimentais de cada material, nas simulações dos perfis de espalhamento dos *phantom* de mama normal e patológica, obtendo resultados mais realísticos e catalogando os resultados de forma que possa ser utilizado como base de dados em trabalhos futuros. Portanto, ainda que preliminares, os resultados deste trabalho corroboram para a exploração de novas técnicas de imagem mamária baseadas no espalhamento elástico de raios X.

Palavras-chave: Espalhamento elástico. Simulação computacional. Tecidos mamários.

ABSTRACT

SATO, K. A. Simulation of elastic scattering profiles of breast tissues and equivalent materials by Monte Carlo code. 2018. 195 p. (Mestrado em Engenharia Elétrica e Informática Industrial) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2018.

In radiodiagnostics, such as mammograms, it is common to consider that scattered radiation is a problem because it degrades the contrast of the image. However, recent studies have shown that it is possible to identify the presence of abnormalities in a biological tissue, from the angular distribution of scattered photons (scattering profile), which provide detailed information on the structural composition of the tissue. Basic studies of this type have been used for computational simulation, due to the difficulties and limitations, both in obtaining, storing and manipulating the samples, as well as in the experimental instrumentation, besides the ethical issues involved. In this work, the elastic scattering profiles of normal and pathological mammary tissues, and the materials equivalent to these tissues, were simulated in the region of intermediate angles, called WAXS (Wide Angle X-ray Scattering). This structure responsible for scattering at the molecular level. For the computational simulation of the scattering profiles was used the Monte Carlo code, with the aid of the MC-GPU software. Its differential in relation to other codes for simulation of profiles in the WAXS region is the possibility of including experimentally measured form factors, which encompass the Molecular Interference Function, instead of only the form factors calculated using the Independent Atomic Model. Two cylindrical virtual phantoms were constructed with internal cylindrical inserts filled with the following materials: adipose tissue, glandular tissue, water, dimethylformamide, ethanol, glycerol and nylon, composing 27 combinations, with specific simulations in each one. These materials were chosen because they presented attenuation characteristics similar to the normal and pathological mammary tissues in the energy used. A monoenergetic photon beam ($K\alpha$ -Cu = 8.54 keV) and a two-dimensional detector were used. The scattering patterns obtained were integrated to obtain the scattering profiles. The results with the virtual phantoms were very similar to those reported in the literature for each of the pure materials inserted in the phantoms. Thus, this work demonstrated the possibility of including the experimental form factors of each material in the simulations of the scattering profiles of the normal and pathological breast phantom, obtaining more

realistic results and cataloging the results in a way that can be used as a database in future work. Therefore, although preliminary, the results of this work corroborate the exploration of new breast imaging techniques based on elastic X-ray scattering.

Keywords: Elastic scattering. Computational simulation. Breast tissues.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Coeficientes de atenuação de alguns materiais e seus equivalentes.	39
Figura 2 – Anatomia mamária.....	43
Figura 3 – Principais tecidos mamários.	44
Figura 4 – Espectro eletromagnético, em ordem crescente do comprimento de onda. Destaque para a região correspondente aos raios X.....	45
Figura 5 – Trecho do espectro eletromagnético com ênfase para os raios X, em ordem crescente da energia do fóton.	45
Figura 6 – Representação esquemática para a produção de raios X.	46
Figura 7 – Ilustração de um espectro de raios X.	47
Figura 8 – Esquema da produção de raios X, por radiação síncrotron.	48
Figura 9 – Esquema de funcionamento de radiação pela inserção de um dispositivo ondulador.....	49
Figura 10 – Esquema de funcionamento de radiação pela inserção de um dispositivo wiggler.	49
Figura 11 – Representação esquemática do efeito foto elétrico.	51
Figura 12 - Espalhamento de raios X por uma partícula qualquer.	52
Figura 13 – Seção de choque diferencial Thomson em função do ângulo de espalhamento.	53
Figura 14 – Fator de forma $F(q, Z)$ para átomo de oxigênio.	55
Figura 15 – Seção de Choque Diferencial de espalhamento Rayleigh para átomo de Oxigênio, com fótons de 17,44 keV.	55
Figura 16 – Fator de forma da molécula de H_2O , $F_{mol}(q)$, obtido utilizando distribuição de densidade eletrônica e $F_{mol}^{IAA}(q)$ alcançado através do modelo atômico independente.	57
Figura 17 – Posição r_i de centros espalhadores.	59
Figura 18 – Seção de choque diferencial elástica para: (i) água líquida a 20°C (MIF); (ii) molécula de água (IAA).	59
Figura 19 – Esquema representativo para definir a equação reduzida da circunferência.	62

Figura 20 – Esquema representativo (sem escala) da geometria do <i>phantom</i> 1, que possui um cilindro externo com um cilindro interno.....	71
Figura 21 – Esquema representativo (sem escala) da geometria do <i>phantom</i> 2, que possui um cilindro externo com dois cilindros internos.	71
Figura 22 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X, na altura $z = 0,5$ cm, para o <i>phantom</i> 1.	74
Figura 23 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X, na altura $z = 0,5$ cm, para o <i>phantom</i> 2.	74
Figura 24 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X girada em 90° em torno do eixo z , na altura $z = 0,5$ cm, para o <i>phantom</i> 2. Na posição 1 (com fonte para cima) à esquerda e na posição 2 (com fonte para baixo) à direita.....	74
Figura 25 – Montagem experimental simulada no <i>software</i> MC-GPU.	75
Figura 26 – Organograma de utilização dos <i>softwares</i> até a etapa de obtenção do perfil de espalhamento.	76
Figura 27 – Organograma de procedimentos realizados no <i>software</i> PENELOPE 2006.	77
Figura 28 – Organograma de procedimentos realizados no <i>software</i> MC-GPU.	79
Figura 29 – Organograma de procedimentos realizados no <i>software</i> MATLAB®.	83
Figura 30 – Arquivo com extensão “.tiff”, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.	83
Figura 31 – Organograma de procedimentos realizados no <i>software</i> fit2d.	83
Figura 32 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 1.....	88
Figura 33 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 1.	89
Figura 34 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 2.....	89
Figura 35 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 2.	90
Figura 36 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 3.....	90
Figura 37 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 3....	91

Figura 38 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 4.....	91
Figura 39 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 4.	92
Figura 40 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 5.....	92
Figura 41 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 5.....	93
Figura 42 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 6.....	93
Figura 43 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 6.	94
Figura 44 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 7.....	94
Figura 45 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 7.....	95
Figura 46 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 8.	96
Figura 47 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 8.....	97
Figura 48 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 8.	97
Figura 49 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 9.	98
Figura 50 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 9.....	98
Figura 51 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 9.....	99
Figura 52 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 10.	99
Figura 53 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 10.....	100

Figura 54 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 10.	100
Figura 55 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 11.	101
Figura 56 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 11.	101
Figura 57 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 11.	102
Figura 58 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 12.	104
Figura 59 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 12.	105
Figura 60 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 13.	105
Figura 61 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 13.	106
Figura 62 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 14.	106
Figura 63 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 14.	107
Figura 64 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 15.	107
Figura 65 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 15.	108
Figura 66 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 16.	108
Figura 67 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 16.	109
Figura 68 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 17.	109
Figura 69 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 17.	110

Figura 70 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 18.....	110
Figura 71 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 18.....	111
Figura 72 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 19.	112
Figura 73 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 19.....	113
Figura 74 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 19.	113
Figura 75 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 20.	114
Figura 76 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 20.....	114
Figura 77 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 20.....	115
Figura 78 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 21.	115
Figura 79 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 21.....	116
Figura 80 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 21.	116
Figura 81 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 22.....	117
Figura 82 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 22.....	117
Figura 83 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 22.	118
Figura 84 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 23, com a fonte de fótons direcionada para cima.....	120
Figura 85 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 23, com a fonte de fótons direcionada para baixo.....	121

Figura 86 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 24, com a fonte de fótons direcionada para cima.....	122
Figura 87 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 24, com a fonte de fótons direcionada para baixo.....	123
Figura 88 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 25, com a fonte de fótons direcionada para cima.....	123
Figura 89 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 25, com a fonte de fótons direcionada para baixo.....	124
Figura 90 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 26, com a fonte de fótons direcionada para cima.....	124
Figura 91 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 26, com a fonte de fótons direcionada para baixo.....	125
Figura 92 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 27, com a fonte de fótons direcionada para cima.....	125
Figura 93 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 27, com a fonte de fótons direcionada para baixo.....	126
Figura 94 – Grandes diferenças entre perfis de espalhamento com IAA e com MIF. Perfil de espalhamento para água, analisada com IAA (à esquerda) e com MIF (à direita).	129
Figura 95 – Destaque para a pasta “pendbase”.	149
Figura 96 – Ícone do programa “material_with_MIF.x”.....	149
Figura 97 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição da criação ou do uso de biblioteca pronta de átomos e compostos.....	150
Figura 98 – Trecho do PENELOPE 2006 solicitando o nome do material.	150
Figura 99 – Trecho do PENELOPE 2006 solicitando o número de elementos na molécula.	151
Figura 100 – Trecho do PENELOPE 2006 para seleção da forma que será definido o composto.....	151

Figura 101 – Exemplo informando a fórmula estequiométrica do PMMA no PENELOPE 2006.	151
Figura 102 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança da energia 152	152
Figura 103 – Exemplo informando a densidade do PMMA no PENELOPE 2006.	152
Figura 104 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança dos valores da força e da energia do oscilador de plasmon estimados, para o caso do PMMA tomado como exemplo.	152
Figura 105 – Arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006.	153
Figura 106 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: tecido adiposo.	154
Figura 107 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: ar.	154
Figura 108 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: dimetilformamida.	154
Figura 109 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: etanol.	155
Figura 110 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: glicerol.	155
Figura 111 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: nylon.	155
Figura 112 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: água.	155
Figura 113 – Exemplo informando a molécula de nylon no PENELOPE 2006, a partir de sua biblioteca.	155
Figura 114 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança dos valores da força e da energia do oscilador de plasmon estimados, para o caso do nylon tomado como exemplo.	156
Figura 115 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá uso de Função de Interferência Molecular (MIF) na análise.	156
Figura 116 – Exemplo de arquivo com os Fatores de Forma do material, no caso, PMMA.	158
Figura 117 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo 158	158
Figura 118 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo 158	158
Figura 119 – Exemplo de arquivo de material com extensão .mat, no caso, nylon com Modelo Atômico Independente (IAA).	160
Figura 120 – Ícone do programa “MC-GPU-create-material-data.x”.	161

Figura 121 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição dos limites de energia a ser utilizados.	161
Figura 122 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição do número de compartimentos de energia.	161
Figura 123 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de entrada, com extensão “.mat”.....	162
Figura 124 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de saída, com extensão “.mcgpu”.....	162
Figura 125 – Mensagem de sucesso na geração do arquivo de material.	162
Figura 126 – Exemplo de arquivo de material com extensão .mcgpu, no caso, nylon com Modelo Atômico Independente (IAA).	163
Figura 127 – Arquivos de entrada para o <i>software</i> MC-GPU.....	165
Figura 128 – Organização das pastas das combinações analisadas. Destaque para o ícone do programa “MC-GPU_v1.3_CPU.x” e para a pasta “GNUPLOT_SCRIPTS_VISUALIZATION”.....	165
Figura 129 – Ícone do programa “gnuplot_images_MC-GPU.gpl”.....	166
Figura 130 – Arquivos de saída do <i>software</i> MC-GPU.	167
Figura 131 – Arquivos finais de saída do <i>software</i> MC-GPU.....	167
Figura 132 – Arquivo “mc-gpu_image.dat” aberto no <i>software</i> MATLAB R2017b.....	169
Figura 133 – Workspace do MATLAB R2017b.	169
Figura 134 - Código para conversão dos dados para um arquivo com extensão “.tiff”, de imagem em 8 bits, não comprimida.	170
Figura 135 – Arquivo com extensão “.tiff”, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.	170
Figura 136 – Tela inicial do <i>software</i> fit2d.....	171
Figura 137 – Tela do <i>software</i> fit2d ao aceitar suas condições de uso.	172
Figura 138 – Trecho da tela de interfaces científicas do <i>software</i> fit2d. Destaque para os botões utilizados nessa mesma tela em alguns procedimentos no decorrer do processo.....	173
Figura 139 – Tela para seleção do arquivo a ser integrado pelo <i>software</i> fit2d, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.....	173

Figura 140 – Tela com o arquivo de entrada (“INPUT”) para o <i>software</i> fit2d, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.....	174
Figura 141 – Marcação do padrão de espalhamento para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF, no <i>software</i> fit2d.	175
Figura 142 – Tela com o arquivo de entrada (“INPUT”) para o <i>software</i> fit2d. Destaque para as opções que foram especificadas.....	176
Figura 143 – Tela do <i>software</i> fit2d para configurar a integração do padrão de espalhamento, no caso, <i>phantom</i> 1 na combinação de nylon com MIF.	177
Figura 144 – Tela para identificação de todos os pontos a serem marcados na imagem do padrão de espalhamento no <i>software</i> fit2d, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.	178
Figura 145 – Tela para definição do tipo de varredura e do feixe na direção azimutal no <i>software</i> fit2d.	179
Figura 146 – Perfil de espalhamento no <i>software</i> fit2d, para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.	180
Figura 147 – Trecho da tela do <i>software</i> fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração.....	180
Figura 148 – Trecho da tela do <i>software</i> fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração com formato “.f2d”.....	181
Figura 149 – Tela do <i>software</i> fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração, em formato “.dat”. Nesta tela, o resultado também pode ser armazenado em formato “.chi”.	182
Figura 150 – Visualização final dos arquivos na pasta “MIF_ nylon”, contendo os arquivos para o caso do <i>phantom</i> 1, na combinação de nylon com MIF.	182

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Comparação dos materiais analisados com IAA, em <i>phantom 1</i>	95
Gráfico 2 – Comparação dos materiais analisados com IAA, em <i>phantom 2</i>	102
Gráfico 3 – Comparação do material PMMA nas diversas combinações em análise com IAA, em <i>phantom 2</i>	103
Gráfico 4 – Comparação do material glicerol nas diversas combinações em análise com IAA, em <i>phantom 2</i>	103
Gráfico 5 – Comparação dos materiais analisados com MIF, em <i>phantom 1</i>	111
Gráfico 6 – Comparação dos materiais analisados com MIF, em <i>phantom 2</i>	118
Gráfico 7 – Comparação do material PMMA nas diversas combinações em análise com MIF, em <i>phantom 2</i>	119
Gráfico 8 – Comparação do material glicerol nas diversas combinações em análise com MIF, em <i>phantom 2</i>	119
Gráfico 9 – Comparação das simulações na Combinação 23, modificando-se o sentido da fonte.	121
Gráfico 10 – Comparação das simulações na Combinação 24, modificando-se o sentido da fonte.....	126
Gráfico 11 – Comparação das simulações na Combinação 25, modificando-se o sentido da fonte.....	127
Gráfico 12 – Comparação das simulações na Combinação 26, modificando-se o sentido da fonte.....	127
Gráfico 13 – Comparação das simulações na Combinação 27, modificando-se o sentido da fonte.....	128

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Combinações realizadas no <i>phantom 1</i> , simuladas com IAA.....	85
Quadro 2 – Combinações realizadas no <i>phantom 2</i> , simuladas com IAA.....	86
Quadro 3 – Combinações realizadas no <i>phantom 1</i> , simuladas com MIF.....	86
Quadro 4 – Combinações realizadas no <i>phantom 2</i> , simuladas com MIF.....	86
Quadro 5 – Combinação realizada no <i>phantom 1</i> , com a fonte girada em 90°, simuladas com IAA.....	87
Quadro 6 – Combinações realizadas no <i>phantom 2</i> , com a fonte girada em 90°, simuladas com MIF.....	87

LISTA DE ACRÔNIMOS E SIGLAS

MIF: Função de Interferência Molecular (traduzida do inglês, *Molecular Interference Function*)

IAA: Modelo Atômico Independente (traduzida do inglês, *Independent Atomic Approximation*)

UTFPR: Universidade Tecnológica Federal do Paraná

LIERX: Laboratório de Imagem e Espectroscopia de Raios X

PMMA: Polimetilmetacrilato

WAXS: Espalhamento de raios X em grandes ângulos (traduzida do inglês, *Wide Angle X-ray Scattering*)

EDXRD: Difração de raios X dispersiva em energia

LISTA DE SÍMBOLOS

nm: nanômetros

μm : micrômetros

mm: milímetros

cm: centímetros

m: metros

h: hora(s)

min: minuto(s)

s: segundo(s)

eV: elétron-volts

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	37
1.1 O CÂNCER DE MAMA NO BRASIL E NO MUNDO	37
1.2 DIAGNÓSTICO PRECOCE PARA O CÂNCER DE MAMA	37
1.3 A DETECÇÃO ATUAL DE NEOPLASIAS MAMÁRIAS	38
1.3.1 Mamografia	39
1.4 APRIMORAMENTO DA DETECÇÃO DE NEOPLASIAS MAMÁRIAS	40
1.5 JUSTIFICATIVA DA DISSERTAÇÃO	40
1.6 OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO	41
1.7 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	42
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	43
2.1 ANATOMIA MAMÁRIA	43
2.2 PRODUÇÃO DE RAIOS X	45
2.2.1 Tubo de raios X	46
2.2.2 Síncrotron	47
2.3 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	50
2.3.1 Vetor de espalhamento	52
2.3.2 Espalhamento elástico	53
2.4 MÉTODO DE MONTE CARLO	60
2.4.1 Características do método	61
2.4.2 O código Monte Carlo e o estudo da radiação	61
2.5 EQUAÇÃO REDUZIDA DA CIRCUNFERÊNCIA	62
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	65
3.1 DESVANTAGEM DO ESPALHAMENTO NO RADIODIAGNÓSTICO	65
3.2 VANTAGEM DO ESPALHAMENTO COMO FONTE DE INFORMAÇÃO ESTRUTURAL DE TECIDOS BIOLÓGICOS	65
4 METODOLOGIA	71
4.1 VISÃO GERAL DA METODOLOGIA	71
4.2 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE PENELOPE (ETAPA 1)	76
4.3 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MC-GPU (ETAPA 2)	79
4.4 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MATLAB® (ETAPA 3)	82
4.5 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE FIT2D (ETAPA 4)	83
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	85
5.1 SIMULAÇÕES APRESENTADAS NA DISSERTAÇÃO	85
5.2 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM UM CILINDRO MENOR INTERNO	88
5.2.1 Tecido adiposo (Combinação 1)	88
5.2.2 Água (Combinação 2)	89
5.2.3 Carcinoma (Combinação 3)	90
5.2.4 Dimetilformamida (Combinação 4)	91
5.2.5 Etanol (Combinação 5)	92
5.2.6 Glicerol (Combinação 6)	93
5.2.7 Nylon (Combinação 7)	94
5.2.8 Comparação	95

5.3 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS	96
5.3.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 8).....	96
5.3.2 Água e nylon (Combinação 9).....	97
5.3.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 10).....	99
5.3.4 Etanol e glicerol (Combinação 11).....	100
5.3.5 Comparação.....	102
5.4 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM UM CILINDRO MENOR INTERNO	104
5.4.1 Tecido adiposo (Combinação 12).....	104
5.4.2 Água (Combinação 13).....	105
5.4.3 Carcinoma (Combinação 14).....	106
5.4.4 Dimetilformamida (Combinação 15).....	107
5.4.5 Etanol (Combinação 16).....	108
5.4.6 Glicerol (Combinação 17).....	109
5.4.7 Nylon (Combinação 18).....	110
5.4.8 Comparação.....	111
5.5 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS	112
5.5.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 19).....	112
5.5.2 Água e nylon (Combinação 20).....	113
5.5.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 21).....	115
5.5.4 Etanol e glicerol (Combinação 22).....	116
5.5.5 Comparação.....	118
5.6 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS, COM FONTE GIRADA EM 90°	120
5.6.1 Água e nylon (Combinação 23).....	120
5.6.2 Comparação.....	121
5.7 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS, COM FONTE GIRADA EM 90°	122
5.7.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 24).....	122
5.7.2 Água e nylon (Combinação 25).....	123
5.7.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 26).....	124
5.7.4 Etanol e glicerol (Combinação 27).....	125
5.7.5 Comparação.....	126
5.8 DEMAIS ANÁLISES DOS RESULTADOS.....	128
6 CONCLUSÃO	131
6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	132
REFERÊNCIAS.....	133
GLOSSÁRIO.....	145
APÊNDICE A – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE PENELOPE, VERSÃO 2006 (ETAPA 1)	149
APÊNDICE A.1 – DEFINIÇÃO DOS ÁTOMOS E COMPOSTOS (ETAPA 1.1)	150
APÊNDICE A.1.1 – Informando novos compostos.....	150
APÊNDICE A.1.2 – Utilizando átomos ou compostos da biblioteca do <i>software</i>	153
APÊNDICE A.2 – OPÇÃO DO USO DA FUNÇÃO DE INTERFERÊNCIA MOLECULAR (ETAPA 1.2)	156

APÊNDICE A.2.1 – Utilizando Fator de Interferência Molecular	157
APÊNDICE A.2.2 – Utilizando Modelo Atômico Independente.....	159
APÊNDICE A.3 – CONVERSÃO DA EXTENSÃO DO ARQUIVO DE MATERIAL (ETAPA 1.3)	161
APÊNDICE B – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MC-GPU (ETAPA 2)	165
APÊNDICE C – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MATLAB® (ETAPA 3)	169
APÊNDICE D – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE fit2d (ETAPA 4)	171
ANEXO A – ARQUIVO DE ENTRADA DO MC-GPU COM EXTENSÃO “.IN”	185
ANEXO B – CÓDIGOS COMPLETOS ADAPTADOS PELA AUTORA.....	187
ANEXO B.1 – GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E UM CILINDRO MENOR INTERNO	187
ANEXO B.2 – GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS	188
ANEXO C – CÓDIGO PARA GERAÇÃO DAS IMAGENS COM O GNUPLOT.....	191
ANEXO D – EXEMPLO DE ARQUIVO DE SAÍDA COM EXTENSÃO “.out”: COMBINAÇÃO COM MIF DE ÁGUA E NYLON NOS CILINDROS INTERNOS DO PHANTOM 2, COM A FONTE EM $y = 0,3$ mm.....	193

1 INTRODUÇÃO

1.1 O CÂNCER DE MAMA NO BRASIL E NO MUNDO

Segundo o Instituto Nacional de Câncer (INCA), o tipo de câncer mais comum entre as mulheres, no Brasil e no mundo, é o câncer de mama, depois do de pele não melanoma (INCA, 2016).

O INCA estimou 59,7 mil novos casos de câncer de mama no Brasil, para o ano de 2018, sendo mais comum depois dos 35 anos de idade, com sua incidência crescendo progressivamente, principalmente após os 50 anos. Nos homens, o câncer de mama responde por apenas 1% dos registros, mas ainda é existente e deve ser levado em consideração (INCA, 2017).

Em nível mundial, um a cada quatro tipos de câncer que afetam as mulheres é de mama, segundo dados da Agência Internacional para a Pesquisa do Câncer, agência da Organização Mundial da Saúde (OMS). Os últimos dados mundiais publicados pela agência para a taxa de incidência desse tipo de câncer ocorreu em 2012, com o registro de 1,6 milhão de casos entre mulheres (FUNDAÇÃO DO CÂNCER, 2016).

O câncer de mama é o tipo que mais mata mulheres no mundo. De acordo com a agência da OMS, 14,7% dos casos de morte por câncer em 2012 eram de pacientes com câncer de mama, cuja taxa de mortalidade foi de 521 907 casos.

No ano seguinte, em 2013, de acordo com o Sistema de Informações sobre Mortalidade (SIM), do Ministério da Saúde do Brasil, 14 388 pessoas morreram de câncer de mama no país. Este foi o último ano com dados publicamente disponíveis. Desse total, 14 206 eram mulheres e 181 homens (FUNDAÇÃO DO CÂNCER, 2016).

1.2 DIAGNÓSTICO PRECOCE PARA O CÂNCER DE MAMA

Quanto antes for a descoberta do câncer de mama, mais altas são as taxas de sucesso do tratamento. De acordo com o INCA, a taxa de sobrevivida após cinco anos (porcentagem de pacientes que vivem pelo menos cinco anos

após o diagnóstico) é maior quando a doença é detectada em seus estágios iniciais (FUNDAÇÃO DO CÂNCER, 2016).

O INCA publicou uma pesquisa com 12 847 pacientes entre 2000 a 2009 revelando que a sobrevivência em cinco anos, de acordo com o estadiamento da doença no início do tratamento, foi de: 88,3% no estágio I (descoberta do câncer é normalmente mais precoce); 78,5% no estágio II; 43% no estágio III; e 7,9% no estágio IV (descoberta do câncer é normalmente mais tardia).

Segundo Seidman et al. (1982) e Michaelson et al. (2002), aproximadamente 90% dos pacientes podem ser curados se o câncer de mama for diagnosticado em sua fase inicial, facilitando seu tratamento.

1.3 A DETECÇÃO ATUAL DE NEOPLASIAS MAMÁRIAS

Atualmente a mamografia é a técnica de detecção de neoplasias mamárias de maior utilização clínica para a detecção precoce de câncer de mama. Basicamente, a mamografia detecta corpos de diferentes densidades e formas nos tecidos mamários. Sua detecção provém da imagem formada por um padrão de contraste gerado num filme, a partir da radiação transmitida que é percebida pelo receptor, modulada em intensidade pelas diferenças em atenuação dos diferentes tecidos da mama do paciente (JOHNS e CUNNINGHAM, 1983; HAUS e CULLINAN, 1996).

Porém, essa técnica apresenta limitações que podem resultar em diagnósticos falso-negativos e falso-positivos, conseqüentemente em casos de câncer não diagnosticados ou biopsias desnecessárias. (MUSHLIN et al. 1998; SOUHAMI e TOBIAS, 1998). Isso acontece porque a diferença nas propriedades de atenuação dos tecidos mamários é pequena e porque há a ocorrência de efeitos de espalhamento, tanto elástico como inelástico, o que gera uma degradação do contraste na imagem, diminuindo os diferentes tons de cinza presentes nas mamografias e, conseqüentemente, dificultando a análise do exame (KOCH et al., 1996; BARNES, 1979, 1991; POLETTI, 1997).

1.3.1 Mamografia

A mamografia, de forma simplificada, possui três fenômenos básicos de interação da radiação com a matéria: efeito fotoelétrico, espalhamento elástico e espalhamento inelástico. O efeito fotoelétrico faz a mamografia ser bem-sucedida, mas os espalhamentos dificultam o exame.

Para estudo de diferentes métodos de detecção utilizam-se *phantoms*, aprimorando-se, assim, as técnicas utilizadas na área de saúde. Os *phantoms* utilizam materiais equivalentes que representam bem determinados materiais.

Em mamografia, o interesse maior está no efeito fotoelétrico e, por isso, os materiais precisam ter coeficientes de atenuação próximos para serem equivalentes. Na Figura 1, pode-se perceber que tecido adiposo é equivalente a dimetilformamida, por exemplo. Contudo, conforme explições anteriores, uma das limitações da mamografia é que os tecidos mamários possuem uma pequena diferença de absorção. Outra limitação é que os efeitos de espalhamento degradam o contraste da imagem e dificultam o exame. Porém, é possível estudar os perfis de espalhamento existentes e, com isso, obter resultados sobre a composição de cada material em análise.

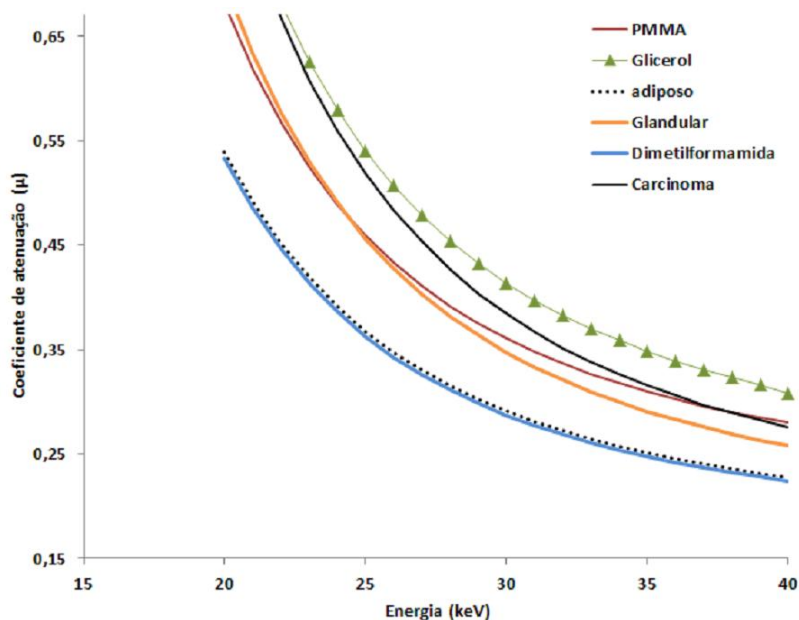


Figura 1 – Coeficientes de atenuação de alguns materiais e seus equivalentes.

Fonte: Badelli, 2017.

1.4 APRIMORAMENTO DA DETECÇÃO DE NEOPLASIAS MAMÁRIAS

Pesquisadores começaram a estudar os efeitos indesejáveis da radiação espalhada na imagem mamográfica (JOHNS e YAFE, 1983; MAGALHÃES et al., 1995) e descobriram que a radiação espalhada pode permitir uma imagem seletiva dos diferentes tipos de tecidos irradiados (SPELLER, 1999).

Isso é possível porque os fótons espalhados carregam dados sobre a estrutura presente nos tecidos do paciente, informações que não são consideradas na mamografia convencional. Em mamografia, 50% da radiação transmitida pela mama é devido aos fótons espalhados (CUNHA et al., 2010). Portanto, a ideia é que uma avaliação da distribuição angular dos fótons espalhados elasticamente (perfil de espalhamento) pode fornecer detalhes sobre possíveis alterações estruturais ocorridas devido à presença de alguma neoplasia mamária, ainda em estágio inicial (CONCEIÇÃO, 2011).

Assim, foram-se intensificando os estudos sobre as propriedades de espalhamento de fótons de baixa energia, como a utilizada em mamografia, com a finalidade de identificar a presença de patologias (KIDANE et al., 1999; LEWIS et al., 2000; POLETTI et al., 2002a,b; FERNÁNDEZ et al., 2002, 2004; ROUND et al., 2005; OLIVEIRA et al., 2008 e CONCEIÇÃO et al., 2009, 2010a,b,c,d). Para isso, é de suma importância a determinação precisa dos perfis de espalhamento (KOSANETZKY et al., 1987; BRADLEY et al., 1989; POLETTI et al., 2002c).

1.5 JUSTIFICATIVA DA DISSERTAÇÃO

Os perfis de espalhamento de estruturas moleculares podem ser medidos experimentalmente através da técnica de espalhamento de raios X em grandes ângulos (CONCEIÇÃO, 2008), mais conhecida por WAXS (do inglês, *Wide Angle X-ray Scattering*). Com essa técnica, podem-se analisar diversos tipos de espalhamento. Porém, para se alcançar os objetivos do presente trabalho optou-se por manter o foco no espalhamento elástico, também conhecido como espalhamento Rayleigh. Estabeleceu-se o uso de WAXS

apenas devido a distância entre amostra e detector ser muito pequena e, portanto, acarretar grandes ângulos chegando no detector.

Ao se utilizar o espalhamento Rayleigh, podem se fazer análises com o uso do Modelo Atômico Independente (IAA) ou com o uso da Função de Interferência Molecular (MIF). Esta última é bem mais precisa que a anterior, pois considera a interação entre as moléculas, como seu próprio nome já diz.

Porém, embora existam trabalhos publicados relatando aplicação das técnicas de WAXS em tecidos mamários (KIDANE et al., 1999; POLETTI et al., 2002b; GRIFFITHS et al., 2007; OLIVEIRA et al., 2008), não existem trabalhos que mostrem claramente as divergências de se realizar análises com o Modelo Atômico Independente (IAA) em relação ao uso da Função de Interferência Molecular (MIF).

1.6 OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO

Este trabalho tem como objetivo geral:

- Simular os perfis de espalhamento elástico de tecidos mamários e materiais equivalentes por código MC-GPU em *phantom* virtual.

Para isso, os objetivos específicos do trabalho são:

- Verificar a utilização do fator de forma experimental para obtenção de resultados mais representativos da realidade;
- Simular em *phantom* virtual os materiais equivalentes utilizados para confecção de *phantoms* para imagem por absorção, mostrando graficamente se ainda são os mais adequados para imagem por espalhamento elástico;
- Viabilizar a realização de estudos futuros com o auxílio de um *software* capaz de realizar simulações mais realísticas, no caso, o MC-GPU.

1.7 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está organizada por capítulos.

O Capítulo 1 é a Introdução e contextualiza a pesquisa, descrevendo a ideia geral do trabalho, incluindo seus objetivos.

O Capítulo 2 é a Fundamentação Teórica, tratando de assuntos prévios importantes para o entendimento do trabalho, tais como a definição da anatomia da mama, formas de produção de raios X, as características do espalhamento elástico (Rayleigh) e do Método Monte Carlo, e o posicionamento do centro de uma circunferência para a posterior demarcação dos cilindros internos de um *phantom* virtual em formato cilíndrico.

O Capítulo 3 é a Revisão Bibliográfica e traz assuntos mais específicos, tais como as características dos tecidos mamários equivalentes do ponto de vista de demais autores da literatura.

O Capítulo 4 é a Metodologia e, portanto, explica todos os procedimentos realizados para se alcançar os objetivos do trabalho. Descreve todos os *softwares* utilizados, os dados de entrada e os arquivos de saída, de forma mais geral, pois seus detalhes se encontram nos capítulos dos Apêndices.

O Capítulo 5 são os Resultados e Discussões a respeito das simulações realizadas. Mostra os resultados obtidos, analisando-os principalmente em termos de viabilidade de sua utilização, ou seja, tempo de simulação e comparação entre o uso de MIF e de apenas IAA.

O Capítulo 6 é a Conclusão do trabalho, finalizando-o com considerações finais a respeito de tudo o que foi feito e de seu potencial de detecção, apresentando também algumas perspectivas para trabalhos futuros.

Vale mencionar que ao final deste trabalho encontra-se um Glossário com algumas palavras que podem auxiliar na leitura. Em seguida, em Anexo encontram-se alguns códigos de programação utilizados no decorrer das simulações. E, por fim, em Apêndice, apresentam-se os procedimentos realizados nos *softwares* de forma mais detalhada, com explicações de forma prática e usual, para possíveis reproduções análogas futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 ANATOMIA MAMÁRIA

2.5.1 Definição

As mamas são anexos da pele e do sistema reprodutivo humano. São constituídas basicamente por (PRITSIVELIS; MACHADO, 2017):

- Parênquima de tecido glandular: glândulas mamárias (glândulas cutâneas modificadas), que se dividem em lóbulos mamários e se destinam à secreção láctea.
- Estroma de tecido conjuntivo: envolvem cada lobo e a glândula como um todo.
- Pele: dotada de uma projeção denominada papila (com abertura para saída do leite) e aréola.

Na Figura 2, pode-se ver a anatomia geral da região mamária. Os lóbulos são glândulas mamárias que produzem leite durante a gravidez e amamentação. Os ductos carregam o leite produzido dos lóbulos para o mamilo, que é envolvido por uma região circular de pele mais escura, a aréola. Os linfonodos axilares filtram o fluido linfático do peito e ajudam o corpo a combater infecções (SAINT..., 2017).

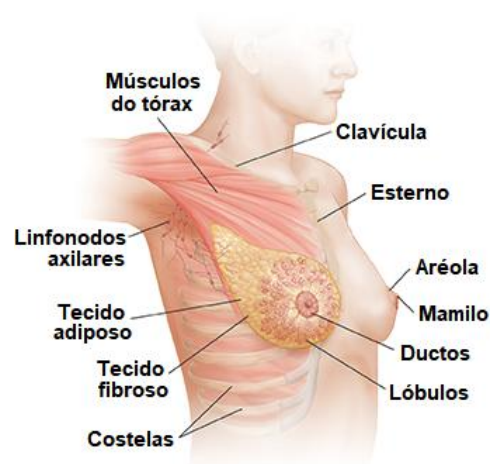


Figura 2 – Anatomia mamária.

Fonte: Traduzido de Saint... (2017).

Os músculos do tórax auxiliam os movimentos do braço. As costelas e o esterno são ossos que podem ser sentidos sob a pele e a clavícula, além disso, é um osso que marca o limite superior do tecido mamário (SAINT..., 2017).

2.5.2 Tecidos mamários

A mama de uma mulher adulta é composta por três principais tecidos, conforme a Figura 3:

- Epitélio glandular, também referenciado como tecido epitelial glandular ou, simplesmente, de “tecido glandular”;
- Estroma e tecido de sustentação, também conhecido como “tecido fibroso”;
- “Tecido adiposo”, que é popularmente chamado de gordura.

O estroma mamário é formado por tecido conjuntivo (fibroso) e adiposo, conferindo, assim, sustentação à mama (PRITSIVELIS; MACHADO, 2017).

O corpo glandular ou glândula mamária, propriamente dita, é formado por dois sistemas: lobular e ductal. Estes sistemas são envolvidos e entremeados por tecido adiposo e tecido conjuntivo de sustentação (estroma mamário), por onde passam os vasos sanguíneos e linfáticos, e os nervos. Todo esse conjunto compõe o parênquima mamário (PRITSIVELIS; MACHADO, 2017).

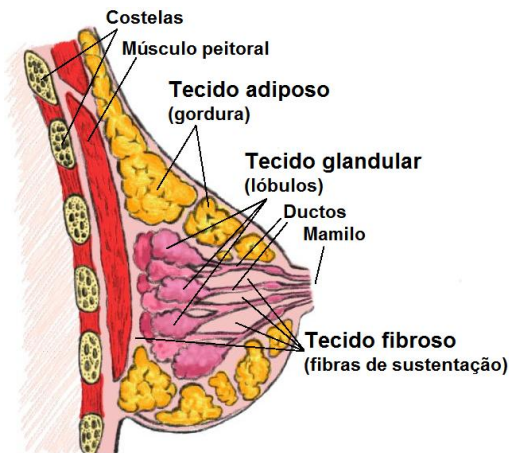


Figura 3 – Principais tecidos mamários.

Fonte: Adaptado de Sato (2017) e Costa (2004).

2.2 PRODUÇÃO DE RAIOS X

Em 1895, Wilhelm Conrad Roentgen, descobriu um tipo até então desconhecido de radiação, a qual denominou de “raios X”. Ele percebeu que os raios X poderiam penetrar a carne humana, mas que não passavam por ossos ou chumbo. A descoberta de Roentgen foi rotulada como um grande avanço no mundo moderno, e o raio X logo se tornou uma importante ferramenta de diagnóstico na medicina, permitindo que os médicos enxergassem, pela primeira vez, o interior do corpo humano sem cirurgia (ARRUDA, 1996). Os raios X descrevem uma grande região no espectro eletromagnético (Figura 4), com intervalo de energia de centenas de elétron-volts (raios X moles, próximo a radiação ultravioleta) até energias de centenas de keV (raios X duros, próximos aos raios gama), conforme a Figura 5, o que possibilita a inspeção do interior de objetos (CONCEIÇÃO, 2011).

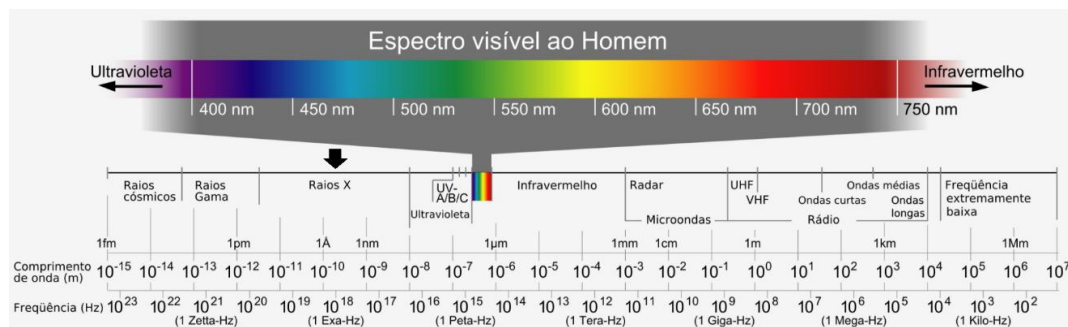


Figura 4 – Espectro eletromagnético, em ordem crescente do comprimento de onda. Destaque para a região correspondente aos raios X.

Fonte: LIMA (2015).

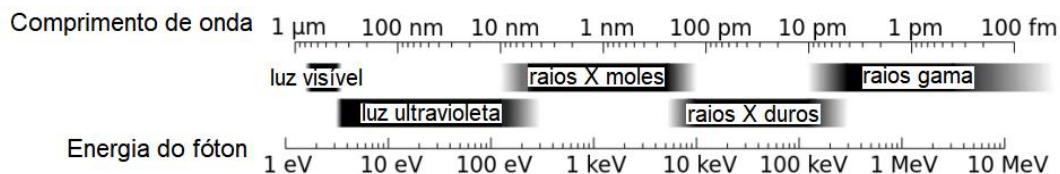


Figura 5 – Trecho do espectro eletromagnético com ênfase para os raios X, em ordem crescente da energia do fóton.

Fonte: Adaptado de UFPR (2017).

Algumas formas de geração de raios X estão mais bem detalhadas nos tópicos a seguir.

2.2.1 Tubo de raios X

Os raios X são uma das maiores ferramentas médicas de diagnóstico desde sua descoberta (CONCEIÇÃO, 2016a). A produção de raios X pode ser esquematizada de acordo com a Figura 6, a qual está representando um tubo de raios X, com cátodo e ânodo, preenchido por vácuo. O cátodo é ligado ao negativo da fonte de tensão e possui um filamento de tungstênio, que é aquecido por uma tensão no circuito, gerando uma nuvem de elétrons. O ânodo é composto por cobre ou molibdênio, normalmente, e está ligado ao positivo da fonte de tensão. Com isso, os elétrons são atraídos e chocam-se contra o ânodo, pois entre o cátodo e o ânodo surge um campo elétrico criado por um potencial da ordem de dezenas de kV, que aceleram os elétrons do cátodo em direção ao ânodo (CONCEIÇÃO, 2011). Isso funciona como uma espécie de anteparo, produzindo os fótons de raios X, por meio de interações entre os elétrons dos átomos (CECCHI; TEIXEIRA; RODRIGUES, 2016).

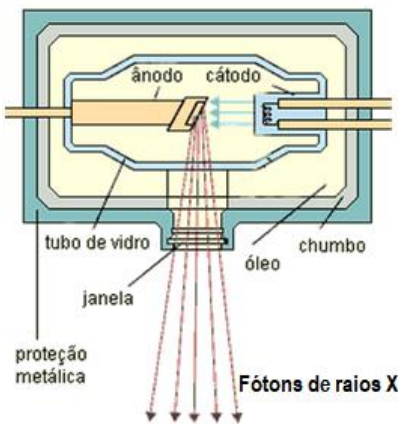


Figura 6 – Representação esquemática para a produção de raios X.

Fonte: Adaptado de Campelo (2012).

Resultante do frenamento ocorre a produção de 99% de calor e apenas 1% de fótons de raios X. Nesses 1% tem-se a radiação característica e a radiação de frenamento (freamento), conforme a Figura 7. Basicamente, pode-se dizer que a radiação de frenamento leva esse nome pelo seu baixo poder de penetração. E a radiação característica é a responsável por gerar os fótons de raios X para radiodiagnóstico (CECCHI; TEIXEIRA; RODRIGUES, 2016).

De acordo com Attix (1986), o espectro de um tubo de raios X apresenta uma componente contínua e outra discreta em energia (Figura 7). A componente contínua é conhecida por radiação branca, raios X de frenagem ou bremsstrahlung, formada pela desaceleração dos elétrons no ânodo através de interações coulombianas inelásticas. A componente discreta, é conhecida por raios X característicos, que são fótons resultantes do preenchimento de uma vacância deixada por um elétron de uma camada mais interna (que interagiu com elétrons provenientes do cátodo) por outro elétron de uma camada superior mais energética. As intensidades entre a radiação branca e a característica dependem do tipo de alvo e da tensão aplicada, podendo ser modificadas com o auxílio de filtros.

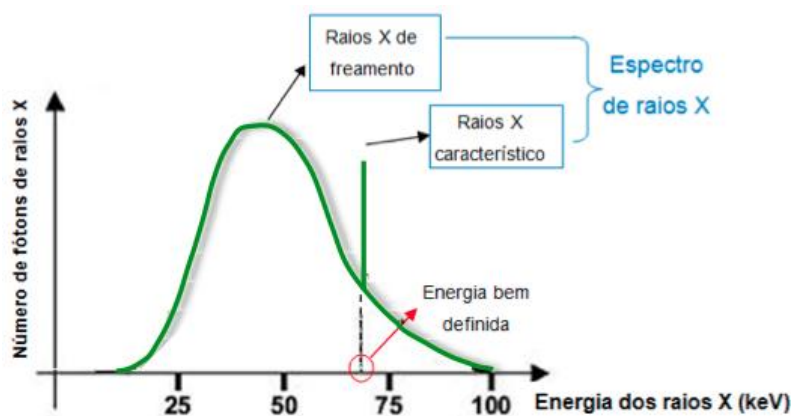


Figura 7 – Ilustração de um espectro de raios X.

Fonte: Adaptado de UTFPR (2017).

2.2.2 Síncrotron

A radiação síncrotron é produzida por elétrons relativísticos acelerados em movimento circular em instalações denominadas síncrotrons. Os elétrons são liberados por efeito termoiônico de um filamento ou por uma fonte radioativa e, para alcançarem velocidade relativística, são acelerados através de um acelerador linear. Posteriormente, são inseridos em um anel de propulsão, onde um campo magnético aumenta sincronicamente, até atingir a energia desejada. Por fim, são injetados em um anel de armazenamento, a verdadeira fonte de radiação, no qual são mantidos em uma órbita estável por meio de campos magnéticos (CONCEIÇÃO, 2011). A radiação síncrotron tem um amplo

intervalo espectral, desde infravermelho até raios X duros, e a faixa de energia de interesse é selecionada por monocromadores (DUKE, 2000).

Na Figura 8, mostra-se um processo de obtenção de raios-X por um anel de armazenamento síncrotron de terceira geração.

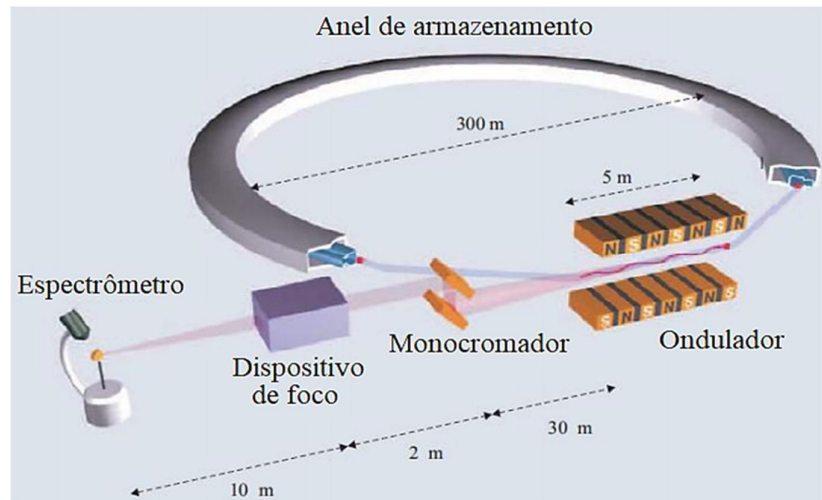


Figura 8 – Esquema da produção de raios X, por radiação síncrotron.

Fonte: Traduzido de Als-Nielsen e McMorrow (2011).

Portanto, a radiação síncrotron é produzida em anéis de armazenamento (Figura 8) onde elétrons ou pósitrons são mantidos circulando com energia constante.

Existem três tipos de fontes: ímãs defletores, onduladores e *wigglers*.

Os ímãs defletores constituem os vértices do anel de armazenamento e são responsáveis por alterar a direção dos elétrons por meio de um dipolo uniforme fazendo com que estes percorram uma órbita circular. Como consequência desta mudança na direção do movimento dos elétrons é emitida radiação, principalmente na direção tangencialmente à órbita circular (CONCEIÇÃO, 2011).

Existem seções das órbitas dos elétrons entre os ímãs defletores em forma de linhas retas, onde *wigglers* e onduladores podem ser instalados. Estas fontes são chamadas dispositivos de inserção, formados por um conjunto de pequenos dipolos com a polaridade alternadamente periódica. Esta variação alternada dos dipolos induz uma trajetória oscilatória dos elétrons, fazendo com

que estes irradiem radiação síncrotron em toda mudança de direção de oscilação (ANTONIASSI, 2008).

As oscilações nos onduladores são pequenas, de forma que as radiações de sucessivas fontes pontuais interferem e dão origem a radiações que possuem somente o comprimento de onda resultante da interferência construtiva destas ondas. A radiação proveniente destas fontes é muito bem colimada e contém comprimentos de onda harmônicos (Figura 9) (ANTONIASSI, 2008).

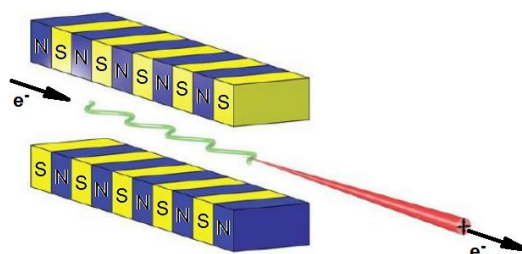


Figura 9 – Esquema de funcionamento de radiação pela inserção de um dispositivo ondulador.

Fonte: UFPR (2017).

As oscilações dos elétrons no *wiggler* são muito mais amplas, onde o fenômeno de interferência não é importante, conforme mostrado na Figura 10. A intensidade dos pólos N é somada. A distribuição espectral é similar à distribuição contínua de radiação dos ímãs defletores (CONCEIÇÃO, 2008).

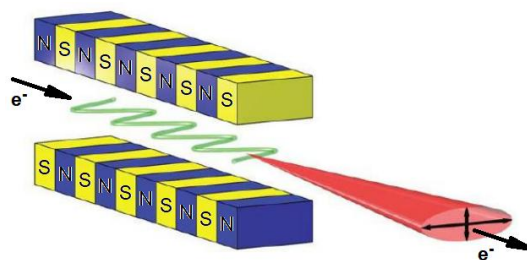


Figura 10 – Esquema de funcionamento de radiação pela inserção de um dispositivo wiggler.

Fonte: UFPR (2017).

O Brasil, especificamente, conta com uma fonte de luz síncrotron, o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em Campinas. O LNLS é uma fonte de radiação síncrotron de segunda geração, cuja energia do elétron no anel de armazenamento é de 1,37 GeV, tendo como fonte um ímã defletor e estações

de *wiggler*, sendo capaz de produzir um fluxo de, aproximadamente, 5.10^{10} fótons.s⁻¹ em 8 keV (CONCEIÇÃO, 2008).

Atualmente, há um projeto de construção em andamento no Brasil para um síncrotron de quarta geração conhecido como Sirius. Esse mais novo acelerador de partículas foi projetado para ser um dos mais novos anéis de luz síncrotron de quarta geração do planeta, com energia duas vezes maior e uma emitância aproximadamente 360 vezes menor que a do atual anel em funcionamento, o UVX, da segunda geração (RAUEN, 2015).

Os raios X gerados por fontes síncrotron resolvem os problemas de se trabalhar com tubos de raios X e possuem brilho muito maior que as fontes padrão de raios X (UFPR, 2017).

2.3 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

Basicamente as interações dos raios X com a matéria dependem da energia dos fótons incidentes e do material que constitui o alvo (número atômico e densidade). Considerando a faixa de energia utilizada, os principais fenômenos de interação da radiação com a matéria em radiodiagnóstico ($E < 140$ keV) são o efeito fotoelétrico e os espalhamentos elástico e inelástico. Em particular, para fótons com energia utilizada em mamografia (17,44 keV) numa amostra de tecido mamário médio (50% adiposo e 50% glandular), 69,76% do total de interações ocorrem por efeito fotoelétrico, 10,42% por espalhamento elástico e 19,82% por espalhamento inelástico (BERGER e HUBBELL, 1987).

Como resumido por Tomal (2007), o efeito fotoelétrico é caracterizado pela transferência total da energia do fóton incidente a um único elétron orbital, que é ejetado (principalmente de uma camada eletrônica mais interna, camada K, por exemplo) com uma energia bem definida $T = h\nu - E_b$, em que $h\nu$ é a energia do fóton e E_b é a energia de ligação do elétron no átomo. Para que o efeito fotoelétrico (Figura 11) ocorra, a energia do fóton incidente deve ser maior ou igual à energia de ligação do elétron no átomo (GERALDELLI, 2012).

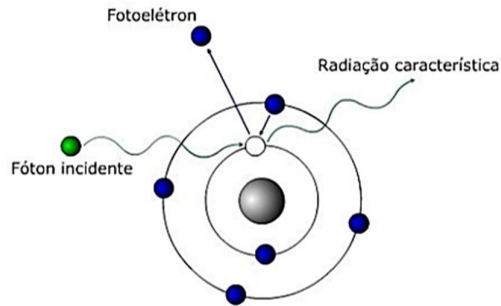


Figura 11 – Representação esquemática do efeito foto elétrico.

Fonte: Geraldelli (2012).

Como visto na Figura 11, o elétron ejetado é denominado fotoelétron. A vacância deixada por este elétron pode ser preenchida através do efeito Auger ou produção de raios X característicos. No efeito Auger a energia excedente criada pela vacância é liberada através de um elétron de uma camada mais externa. Já, a emissão de raios X característicos ocorre quando a vacância é preenchida por um elétron de uma camada mais energética e o fóton produzido tem energia igual à diferença de energia entre os dois níveis de energia (CONCEIÇÃO, 2011).

Em contrapartida, quando um fóton incidente interage com um elétron atômico e transfere parte de sua energia a este elétron de forma a liberá-lo, caracteriza-se o processo de espalhamento inelástico ou Compton e um fóton com energia menor que a incidente é emitido (SANTOS, 2008).

Denomina-se espalhamento elástico ou coerente, quando um fóton interage com a matéria desviando-se de sua trajetória inicial de modo que não sofra variação em sua energia. O campo elétrico da onda eletromagnética incidente, com comprimento de onda λ , associada a esse fóton induz oscilações, como em um dipolo, nos elétrons presentes na matéria. Por sua vez, estas cargas aceleradas, geram ondas secundárias (radiação espalhada) de mesmo comprimento de onda λ que a radiação incidente (JOHNS e CUNNINGHAM, 1983).

Nesta seção serão apresentados os tipos de interações por espalhamento elástico passíveis de ocorrência em virtude da incidência de raios X na matéria. Com o intuito de facilitar o entendimento de tais fenômenos, serão definidos, primeiramente, o vetor de espalhamento associado aos feixes

de raios X e, posteriormente, o fator de forma associada a interação de fótons com a matéria ou alvo.

2.3.1 Vetor de espalhamento

O espalhamento elástico decorrente da interação de um fóton, de comprimento de onda λ , com um elétron de um átomo qualquer está representado na Figura 12, que ilustra o centro de espalhamento O , o vetor de onda do fóton incidente \vec{k} , do fóton espalhado \vec{k}' e o vetor de espalhamento \vec{q} , também conhecido como momento transferido. Este é definido como:

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} \quad (1)$$

em que: $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$. A interferência será construtiva ou destrutiva dependendo da diferença de fase entre os diferentes fótons espalhados (CONCEIÇÃO, 2011).

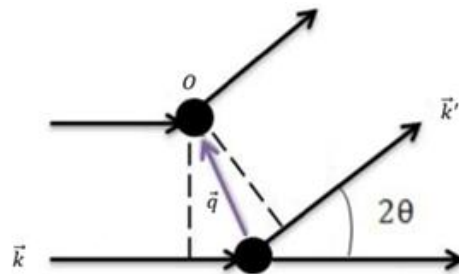


Figura 12 - Espalhamento de raios X por uma partícula qualquer.
Fonte: Adaptado de Costa (2014).

O módulo do vetor espalhamento é definido por q , pois $q = |\vec{q}|$ dado por:

$$q = 4\pi \left(\frac{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\lambda} \right) \quad (2)$$

2.3.2 Espalhamento elástico

2.3.2.1 Espalhamento por elétron livre

O espalhamento elástico decorrente da interação de um fóton com um elétron livre é chamado de espalhamento Thomson. Esse espalhamento tem tal denominação em homenagem ao célebre cientista Joseph J. Thomson que estudou sua seção de choque (THOMSON, 1908; LOPES e MARTINS, 2009). Considerando a interação de fótons não polarizados, Thomson obteve a seguinte equação:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} = \frac{r_0^2(1 + \cos^2 \theta)}{2} \quad (3)$$

na qual $r_0 = 2,82 \times 10^{-15} m$ é o raio clássico do elétron e θ é o ângulo de espalhamento.

A forma da seção de choque Thomson pode ser vista na Figura 13.

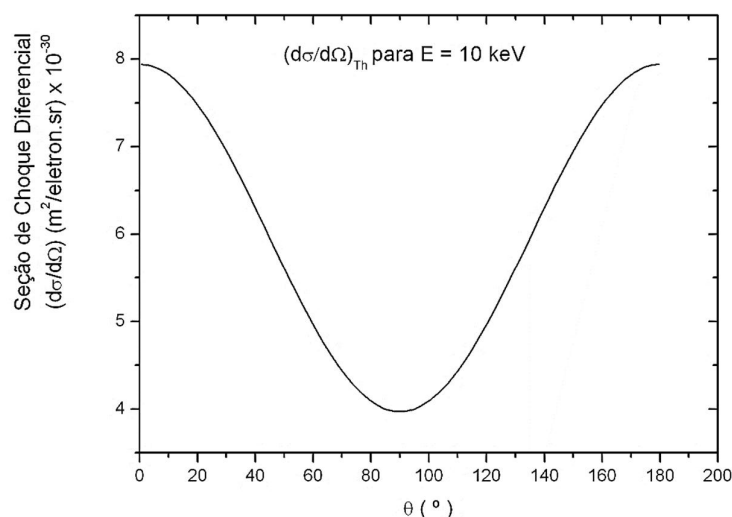


Figura 13 – Seção de choque diferencial Thomson em função do ângulo de espalhamento. Fonte: Conceição (2011).

A seção de choque diferencial elástica, ao ser polarizada, é definida por:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} = r_0^2(1 - \sin^2 \theta \cos^2 \phi) \quad (4)$$

em que θ é o ângulo polar de espalhamento e ϕ é ângulo azimutal de espalhamento (medido da direção de polarização) (HANSON, 1986).

2.3.2.2 Espalhamento por múltiplos elétrons

Considerando que a carga de um elétron está distribuída volumetricamente (por toda a sua extensão), segundo a densidade de carga ρ_e , neste caso então a amplitude total espalhada devido a cada elemento de carga ($\rho_e dV$) dependerá do fator de espalhamento por elétron (f_e) (CONCEIÇÃO, 2012). Este fator representa a transformada de Fourier da distribuição de cargas do elétron, expresso por:

$$f_e = \int e^{i(\vec{q}\vec{r})} \rho_e dV \quad (5)$$

2.3.2.3 Espalhamento por átomo livre

O espalhamento elástico de fótons por um átomo livre é conhecido como espalhamento Rayleigh. Esse espalhamento recebe essa nomeação em homenagem ao também célebre cientista Lord Rayleigh, o qual foi o cientista que discutiu o espalhamento para a luz visível (KRAPAS e DOS SANTOS, 2002). Devido à diferença de caminho ótico percorrido no átomo, as ondas espalhadas por cada elétron sofrem interferência construtiva e a seção de choque diferencial pode ser expressa na forma:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Ray} = [F(q, Z)]^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} \quad (6)$$

Na Equação 6, q representa o vetor de espalhamento que equivale ao momento transferido pelo fóton ao interagir com um átomo, Z é o número atômico e $F(q, Z)$ é o fator de forma atômico que equivale a transformada de Fourier associada a distribuição de cargas do átomo (GUINIER, 1994). A soma de fatores de forma individuais de cada camada eletrônica pode constituir o fator de forma total de um átomo (HUBBELL et al., 1975).

O espalhamento Rayleigh resulta da interação de fótons com um átomo livre. Este espalhamento está diretamente ligado a conservação de energia dos fótons incidentes e a variação de momento decorrente da interação com os elétrons ligados ao átomo alvo. As ondas espalhadas surgidas das interferências construtivas pelos elétrons, os quais compõem o alvo, são

consequência da diferença de caminho ótico percorrido no átomo. O fator de forma do átomo de oxigênio em função do momento transferido obtido por Hubbell et al. (1975) é mostrado na Figura 14. Observa-se, a partir da figura, que os valores do momento transferido q do fator de forma $F(q, Z)$, considerando um mesmo Z , indica a ocorrência de interferência: (i) construtiva $q \rightarrow 0$ e $F(q, Z) \rightarrow Z$ ou (ii) destrutiva $q \rightarrow \infty$ e $F(q, Z) \rightarrow 0$ (OLIVEIRA, 2006).

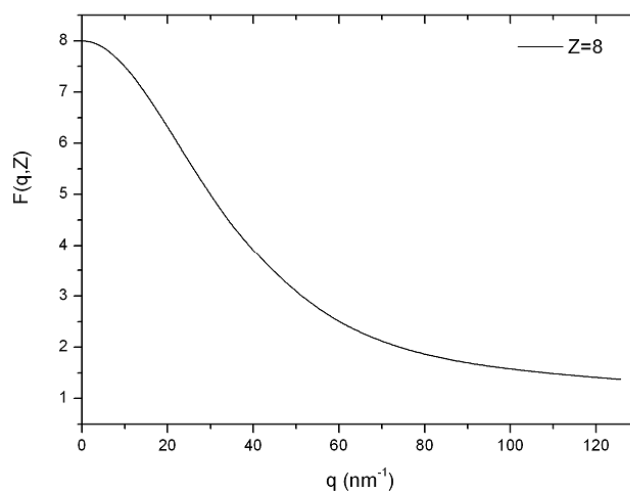


Figura 14 – Fator de forma $F(q, Z)$ para átomo de oxigênio.

Fonte: Hubbell et al. (1975).

Este comportamento modela a seção de choque Thomson, produzindo a seção de choque diferencial $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Ray}$, conforme a Figura 15.

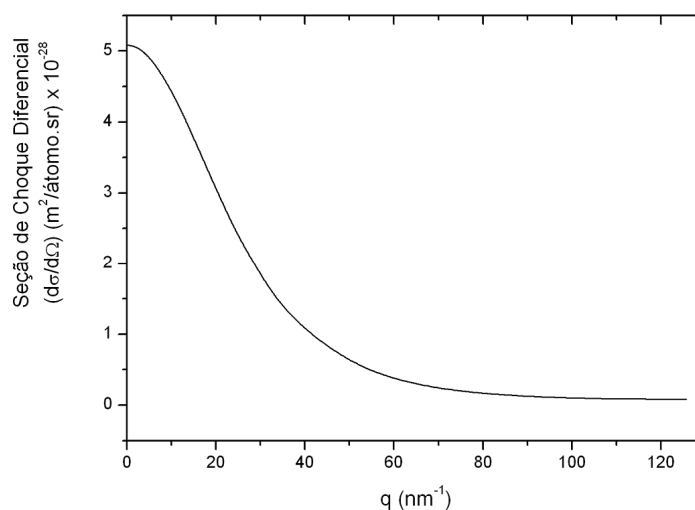


Figura 15 – Seção de Choque Diferencial de espalhamento Rayleigh para átomo de Oxigênio, com fótons de 17,44 keV.

Fonte: Conceição (2011).

2.3.2.4 Espalhamento por molécula livre

A seção de choque diferencial para uma molécula livre é representada pela seguinte equação:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{mol} = F_{mol}^2(q) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} \quad (7)$$

onde $F_{mol}^2(q)$ representa o fator de forma molecular.

Este fator de forma pode ser obtido através de três aproximações (HUBBELL et al., 1975):

- Para a primeira aproximação: por meio da distribuição de densidade eletrônica dentro da molécula (BLUM, 1971; HUBBELL et al., 1975);
- Para a segunda aproximação: através das distâncias atômicas no interior da molécula (NARTEN e LEVY, 1971);
- Para a terceira aproximação: pelo Modelo Atômico Independente (IAA) (CHAN e DOI, 1983).

O Modelo Atômico Independente (também conhecido como “IAA”, do inglês) parte do pressuposto que as contribuições independentes de cada átomo, isto é, o fator de forma molecular, poderá ser determinado pela soma dos fatores de forma de cada átomo que pertence a um arranjo molecular qualquer (MACEDO, 2016). É possível calcular o fator de forma molecular de misturas ou compostos quando o seu número de átomos for:

(i) conhecido, representado pela equação a seguir:

$$F_{mol}^2(q) = \sum n_i F_i^2(q) \quad (8)$$

em que n_i representa o número de átomos de cada elemento e $F_i^2(q)$ o fator de forma de cada átomo;

(ii) desconhecido, representado pela relação matemática seguir:

$$\frac{F_{mol}^2(q)}{M} = \sum \frac{w_i}{m_i} F_i^2(q) \quad (9)$$

calculado a partir do valor do peso molecular M e da razão entre a massa do átomo w_i e sua massa atômica m_i .

O comportamento da função $F_{mol}(q)$ para molécula de água utilizando a distribuição de densidade de carga eletrônica (primeira aproximação mencionada) (HUBBEL et al., 1975) e o modelo atômico independente (última aproximação mencionada) é mostrado na Figura 16 (CHAN e DOI, 1983). Observa-se que as duas aproximações convergem para o mesmo valor quando $q > 40 \text{ nm}^{-1}$.

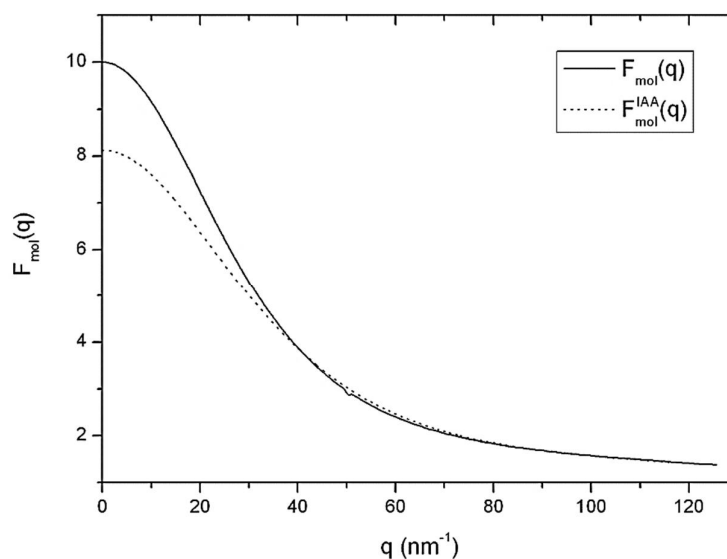


Figura 16 – Fator de forma da molécula de H_2O , $F_{mol}(q)$, obtido utilizando distribuição de densidade eletrônica e $F_{mol}^{IAA}(q)$ alcançado através do modelo atômico independente.

Fonte: Hubbell et al. (1975).

É útil nesta parte definir o coeficiente linear de espalhamento elástico, μ_{CS} , o qual está diretamente relacionado à seção de choque diferencial elástica por:

$$\mu_{CS} = n_V \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (10)$$

em que n_V é o número de átomos ou moléculas por unidade de volume ($n_V = \frac{\rho \cdot N_A}{M}$) sendo ρ a densidade da amostra, M a massa atômica ou molecular e N_A o número de Avogadro.

2.3.2.5 Espalhamento por um conjunto de moléculas

O fator de forma e suas aproximações permitem descrever o espalhamento elástico para um conjunto de moléculas. Sua representação diferencial é dada por:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{conj} = Y(q) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{mol} = F_{eq}^2(q) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} \quad (11)$$

onde:

- $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{conj}$ é a seção de choque diferencial para um conjunto de moléculas;
- $Y(q)$ representa a função interferência;
- $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{mol}$ é o fator de forma para uma molécula livre;
- $F_{eq}^2(q)$ é o fator de forma equivalente, que possibilita a determinação da seção de choque para um conjunto de moléculas tomando-se por base a seção de choque de Thomson, $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th}$.

A expressão para o coeficiente linear de espalhamento elástico por molécula é da forma:

$$\mu_{CS} = n_V \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas} = n_V Y(q) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{elas}^{mol} = n_V Y(q) F_{mol}^2(q) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \quad (12)$$

E $Y(q)$ assume a forma:

$$Y(q) = 1 + \sum_i \gamma_i \frac{\text{sen}(qr_i)}{qr_i} \quad (13)$$

O termo γ_i da equação corresponde a diferença entre as densidades eletrônicas médias e a densidade eletrônica de centros espalhadores para cada posição r_i (POLETTI et al., 2002b), conforme a Figura 17.

Deduzidos dos dados experimentais realizados por Narten e Levi (1971), a Figura 18 mostra a seção de choque diferencial para água líquida a 20°C obtida a partir do fator de forma equivalente tabulado por Morin (1982). É possível visualizar que a função de interferência provoca oscilações na seção de choque do conjunto de moléculas, que ocorrem em torno da seção de choque

da molécula livre calculada a partir do IAA (OLIVEIRA, 2006), observando-se também a existência de interferência destrutiva para valores baixos de momento transferido (KLUG e ALEXANDER, 1974). Para valores de q maiores as duas curvas convergem para os mesmos valores. Utilizando a lei de Bragg a partir dos picos de espalhamento (CULLITY, 1978), pode-se obter a distância de correlação para o material analisado, no caso da figura, a água.

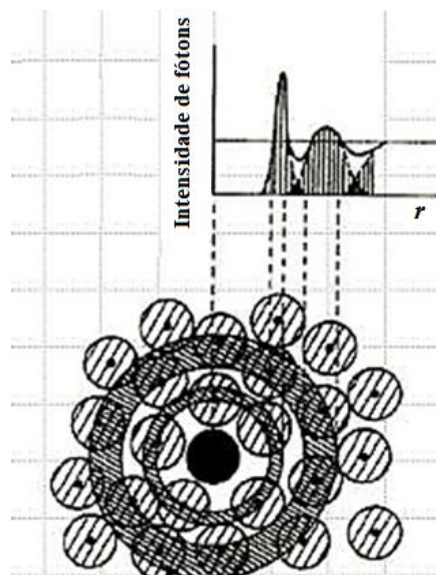


Figura 17 – Posição r_i de centros espalhadores.

Fonte: Adaptado de Vailionis (2016).

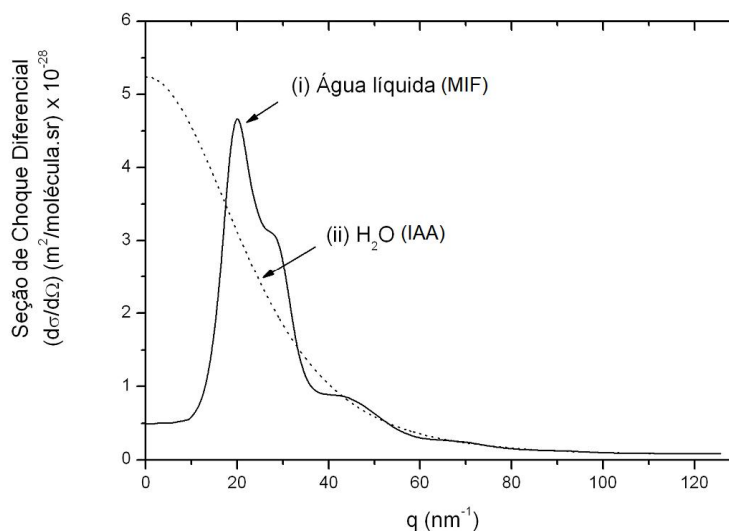


Figura 18 – Seção de choque diferencial elástica para: (i) água líquida a 20°C (MIF); (ii) molécula de água (IAA).

Fonte: Adaptado de Morin (1982).

2.4 MÉTODO DE MONTE CARLO

O método de Monte Carlo foi formalizado em 1949, por meio do artigo intitulado “Monte Carlo Method”, publicado por John Von Neumann e Stanislaw Ulam (PALTANI, 2011). Esse método é uma técnica que utiliza a amostragem de números aleatórios e métodos estatísticos para encontrar soluções de problemas físicos ou matemáticos. A técnica é utilizada quando a formulação exata para a solução do problema é praticamente impossível ou muito trabalhosa de ser determinada por métodos de solução direta (PIANOSCHI, 2008).

No método de Monte Carlo, um modelo estocástico representa o processo de interesse e um gerador de números aleatórios de alta qualidade é utilizado para amostrar a função densidade de probabilidade definida no modelo. O resultado é uma estimativa de uma característica quantitativa física de um processo específico com um alto grau de precisão (KRAMER, CROWLEY e BURNS, 2000). Assim, o método é utilizado em campos de conhecimentos que vão desde simulações de complexos fenômenos físicos a problemas da área da saúde, como tomografia e mamografia, por exemplo (PUC-RIO, 2017).

Constitui um método bastante simples e que pode ser aplicado em problemas com qualquer nível de complexidade. Paula (2014) explica detalhadamente todo seu equacionamento, mostrando exemplos práticos de aplicações. Além disso, Paltani (2011) também apresenta diversos exemplos práticos de sua aplicação física, com todos seus respectivos cálculos e ilustrações.

Porém, o resultado da simulação é fortemente dependente da função densidade de probabilidade dos efeitos sendo simulados. E, por isso, outros autores destacam que a maior desvantagem do método é que o erro da solução procurada é função do número de eventos simulados, o que tende a aumentar o tempo de simulação tornando o método muito lento (BINDER e HEERMANN, 1988; WANG et al, 2005; ROGERS, 2006). O número de eventos simulados foi utilizado no programa MC-GPU e é chamado de “TOTAL NUMBER OF HISTORIES”, em destaque no Anexo A deste trabalho.

2.4.1 Características do método

A exigência principal do método de Monte Carlo diz respeito ao sistema físico ou matemático descrito (modelado) em termos de funções densidade de probabilidade (PAULA, 2014). Com essa condição, torna-se desnecessário escrever as equações diferenciais que descrevem o comportamento de sistemas complexos. Assim, conhecidas essas funções de probabilidades, a simulação de Monte Carlo pode ser executada fazendo as amostragens aleatórias a partir das mesmas (NASSER, 2012). Este processo é repetido inúmeras vezes e o resultado desejado é obtido por meio de técnicas estatísticas – média, desvio padrão, dentre outras – sobre um determinado número de realizações (amostras).

Pode-se dizer que realizar uma simulação usando o método de Monte Carlo consiste em executar cinco passos básicos (NASSER, 2012):

- a. Definir a função densidade de probabilidade para representar o comportamento de cada uma de suas incertezas.
- b. Gerar valores pseudo-aleatórios aderentes à função densidade de probabilidade de cada incerteza do problema.
- c. Calcular o resultado determinístico substituindo as incertezas pelos valores gerados, obtendo uma observação do problema.
- d. Repetir os passos “b” e “c” até se obter uma amostra com o tamanho desejado de realizações.
- e. Agregar e manipular os resultados da amostra de forma a obter uma estimativa da solução do problema.

2.4.2 O código Monte Carlo e o estudo da radiação

Desde o século XX, estuda-se o problema do transporte da radiação com a matéria. Atualmente, sabe-se que fótons, elétrons e pósitrons, quando penetram na matéria, podem sofrer múltiplas interações em que a energia das partículas pode ser transferida para os átomos ou moléculas do material e partículas secundárias podem ser produzidas (PIANOSCHI, 2008).

A interação da radiação da matéria é um típico exemplo de fenômeno probabilístico, podendo assim se utilizar o método de Monte Carlo, em forma de código computacional, como uma ferramenta para estudar o fenômeno de transporte e atenuação da radiação em meios materiais.

No código Monte Carlo para simulação do transporte da radiação, de acordo com Pianoschi (2008), os eventos de uma partícula são descritos como uma sequência probabilística de interações que, no final, altera a sua direção de movimento da partícula, podendo ou não perder parcialmente ou totalmente sua energia e , ocasionalmente, gerar uma partícula secundária.

A função densidade de probabilidade definida para o modelo de interação determina a probabilidade de interação das partículas ao longo do caminho simulado, pois estabelece o alcance para os elétrons e o livre caminho médio para os fótons, o tipo de interação, a perda de energia e a deflexão angular que as partículas sofrerão em cada evento (PIANOSCHI, 2008).

2.5 EQUAÇÃO REDUZIDA DA CIRCUNFERÊNCIA

Por definição matemática, circunferência é o lugar geométrico de todos os pontos do plano cartesiano cuja distância até um determinado ponto “C” (centro da circunferência) é igual a “ r ” (raio da circunferência), conforme a Figura 19.

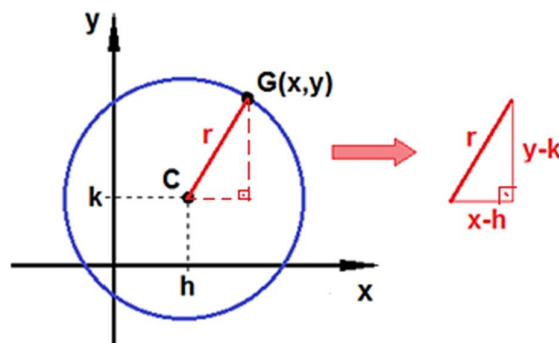


Figura 19 – Esquema representativo para definir a equação reduzida da circunferência.

Fonte: Adaptado de O Kuadro (2013).

Para explicar a definição da equação reduzida da circunferência, adotou-se um ponto genérico $G(x,y)$ da mesma. Além disso, sabe-se que a

distância entre o ponto “C” e o ponto “G” é igual a “r”. E também que h e k são a abscissa e a ordenada do ponto C, respectivamente.

Pode-se perceber na figura a existência do formato de um triângulo retângulo. Assim, é possível aplicar a definição do Teorema de Pitágoras, no qual a soma dos quadrados dos catetos do triângulo é igual ao quadrado de sua hipotenusa, conforme a seguinte equação (GIOVANNI; BONJORNIO; GIOVANNI JUNIOR, 1994, p. 526):

$$(x - h)^2 + (y - k)^2 = r^2 \quad (14)$$

Esta Equação 14 foi utilizada para a programação do código do arquivo de geometria que foi utilizado no *software* MC-GPU.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A seguir, são apresentadas as vantagens e desvantagens do papel do espalhamento no radiodiagnóstico, apresentando uma breve revisão bibliográfica da literatura referente ao fenômeno de espalhamento elástico para determinação de estruturas em materiais.

3.1 DESVANTAGEM DO ESPALHAMENTO NO RADIODIAGNÓSTICO

Nas imagens radiográficas convencionais é possível detectar corpos de diferentes densidades e formas em um dado material, pelas diferenças de coeficiente atenuação linear dos diversos tipos de tecidos e materiais. Para gerar um padrão de contraste no filme, a radiação transmitida composta da radiação primária juntamente com a espalhada é percebida por um receptor de imagem, um detector, formando uma combinação tela-filme (JOHNS e CUNNINGHAM, 1983).

Porém, o detector não diferencia os fótons espalhados dos transmitidos sem nenhuma interação. Assim, os fótons espalhados contribuem para a redução do contraste da imagem radiológica em até 60%, caso não sejam reduzidos (BARNES, 1991). Na mamografia, esta degradação do contraste torna-se crítica (CUNHA et al. 2010) e, por esse motivo, são feitos diversos investimentos para exploração e controle do efeito da radiação espalhada, de forma a permitir que a imagem contenha informações mais claras e precisas tais como o uso de grades e espaço de ar, por exemplo (BARNES, 1979; POLETTI et al., 1997, 2001).

3.2 VANTAGEM DO ESPALHAMENTO COMO FONTE DE INFORMAÇÃO ESTRUTURAL DE TECIDOS BIOLÓGICOS

Nos últimos anos, o conceito do espalhamento como desvantagem vem mudando, por dois fatores principais. Primeiro, porque fótons espalhados carregam informações sobre a estrutura presente nos tecidos do indivíduo

(SPELLER, 1999) e tal informação não é considerada em radiografia convencional. Segundo, porque na maioria das energias de aplicações médicas a interação mais provável é o espalhamento, elástico e inelástico (JOHNS e CUNNINGHAM, 1983). Estes fatos levaram à investigação das propriedades de espalhamento dos diferentes tecidos biológicos incluindo ossos (ROYLE e SPELLER, 1995; BATCHELAR et al., 2006), cérebro (SIU et al., 2005), rim (ANCHAROV et al., 2005) e mama (KIDANE et al., 1999; LEWIS et al., 2000; POLETTI et al., 2002b; FERNÁNDEZ et al., 2002, 2004; ROUND et al., 2005; OLIVEIRA et al., 2008 e CONCEIÇÃO, 2009), como meio de determinar as características de suas estruturas e, assim, identificar patologias. Devido a isso, existe a necessidade da obtenção de medidas precisas dos perfis de espalhamento dos diferentes tecidos humanos (KOSANETZKY et al., 1987; BRADLEY et al., 1989; POLETTI et al., 2002c).

Por causa dos efeitos coletivos de espalhamento decorrentes de átomos moléculas ou arranjos supramoleculares presentes no material, ocorre a distribuição do número de fótons espalhados elasticamente em função do ângulo de espalhamento. Essa distribuição recebe o nome de perfil de espalhamento. Cada material possui um único e característico perfil de espalhamento, o qual pode ser computado se forem conhecidos os parâmetros estruturais, como distribuição eletrônica espacial, distância entre átomos, dentre outros.

Para Kane et al. (1985), os fenômenos de espalhamento em altos ângulos para uma dada energia são devido à estrutura atômica do material, não sendo detectadas interferências entre os diversos átomos que compõem o tecido. Já em ângulos intermediários aparecem interferências atômicas ou moleculares para Klug e Alexander (1974) e, em baixos ângulos surgem interferências de grupos de moléculas (estruturas supramoleculares) para Glatter e Kratky (1982).

Os perfis de espalhamento podem ser medidos experimentalmente através das técnicas de espalhamento Rayleigh, por espalhamento de raios X em grandes ângulos (do inglês, *Wide Angle X-ray Scattering*), conhecido como WAXS, e por espalhamento de raios X em baixos ângulos (do inglês, *Small Angle X-ray Scattering*), conhecido como SAXS. Este trabalho tem seu foco nos perfis de espalhamento produzidos em WAXS, devido à pequena distância entre amostra e detector, ocasionando fótons espalhados em grandes ângulos.

A técnica de WAXS permite obter a função de correlação de pequenas estruturas presentes em um tecido, cujo tamanho esteja entre 1 e 10 Å, por exemplo água e pequenas moléculas, como as de ácidos graxos (PEPLOW e VERGHESE, 1998; KIDANE et al., 1999; POLETTI et al., 2002a, 2002b; CUNHA et al., 2006; GRIFFITHS et al., 2007; RYAN e FARQUHARSON, 2007; OLIVEIRA et al., 2008).

Kosanetzky et al. (1987) utilizaram um difratômetro de raios X com ânodo de cobalto ($K\alpha = 6,935$ keV) para medir os perfis de espalhamento da água, de vários materiais plásticos equivalentes e de alguns tecidos biológicos de animais, e observaram que o tecido adiposo possui um alto grau de ordenamento, notando também diferenças entre os perfis de espalhamento dos tecidos de diferentes órgãos.

Com o auxílio de uma fonte monoenergética de raios gama de ^{241}Am (59,54 keV), Bradley et al. (1989) mediram a seção de choque elástica da água, de nylon e de lucite, apresentando um método para correção dos dados experimentais. Além disso, ocorreram a existência de picos de espalhamento em diferentes posições angulares para cada material.

Utilizando um feixe polienergético produzido por um tubo de raios X com ânodo de cobre (energia média efetiva de 46 keV) e um contador proporcional bidimensional sensível a posição, como detector, Evans et al. (1991) mediram o perfil de espalhamento de tecidos mamários (adiposo, fibroglandular, tumor benigno, carcinoma e fibroadenoma), de sangue e de alguns materiais equivalentes. Tabularam as posições do pico principal de espalhamento e o valor da largura à meia altura de cada tipo de amostra, observando grandes diferenças entre os perfis dos tecidos adiposo e fibroglandular, além de pequenas diferenças entre carcinomas e tecido fibroglandular.

As seções de choque diferencial molecular de espalhamento coerente de gordura proveniente de suínos e de polimetilmetacrilato (PMMA), foram medidas por Tartari et al. (1997b), utilizando-se um tubo de raios X com ânodo de cobre ($K\alpha = 8,04$ keV). Eles tabularam o fator de forma a partir dos dados obtidos, considerando os materiais como sendo monomoleculares, mostrando que o PMMA não é um material adequado para simular o espalhamento de tecido adiposo. Além disso, mostraram ainda fatores de correção relevantes que devem

ser aplicados aos dados experimentais (1998) e um estudo da validade da aproximação do Modelo Atômico Independente (1997b).

Peplow e Verghese (1998) tabularam o fator de forma molecular de espalhamento coerente de materiais plásticos, de tecidos biológicos de animais e de tecido mamário humano. Para tanto, utilizaram radiação síncroton monoenergética de 8 keV e 20 keV e apresentaram um cálculo para obter o fator de forma através das distribuições medidas utilizando o método de Monte Carlo. Todavia, apenas uma amostra de tecido mamário foi tabulada, a qual não possuía classificação histológica.

Através da técnica de EDXRD (difração de raios X dispersiva em energia), com um tubo de raios X com ânodo de tungstênio ($K\alpha = 58,86$ keV), Kidane et al. (1999) mediram o perfil de espalhamento para tecidos mamários normais e neoplásicos. Os perfis de espalhamento dos diferentes tipos de tecidos foram comparados, determinando a composição histológica de cada um. Os autores mostraram que é notória as diferenças entre os perfis de espalhamento de tecidos normais e neoplásicos. As posições e altura dos picos principais de cada espalhamento foram tabuladas, porém os perfis possuem pobre resolução em momento transferido.

Tartari et al. (1999) mediram a seção de choque diferencial molecular de tecido ósseo e compararam os resultados obtidos anteriormente (1997) para gordura e PMMA com os resultados de outros autores. Em seguida, Tartari et al. (2000) mostraram que é possível obter o fator de forma de tecidos biológicos hipotéticos através da combinação linear dos fatores de forma de alguns componentes de gordura, colágeno, componentes minerais de tecidos ósseos e água, utilizando simulações de Monte Carlo para a geometria experimental utilizada. Anos depois, Tartari et al. (2002) tabularam os fatores de forma moleculares para gordura, água, matriz óssea e componente mineral ósseo e, através de simulações de Monte Carlo de um difratômetro comercial operando em modo de reflexão, obtiveram os fatores de forma para tecido adiposo e muscular, comparando-os com os resultados obtidos experimentalmente por outros autores.

Para medir o coeficiente linear de espalhamento elástico de tecidos mamários normais e neoplásicos, e materiais equivalentes, Poletti et al. (2002a) utilizaram tubos de raios X com ânodo de cobalto ($K\alpha = 6,93$ keV) e de

molibdênio ($K\alpha = 17,44$ keV), mostrando diferenças consideráveis entre os resultados obtidos para tecidos mamários e para materiais equivalentes. Também foram observadas diferenças entre os tecidos normais e os neoplásicos. Em novas comparações entre tecidos mamários (adiposo e glandular) e materiais equivalentes (2002b), encontraram novamente diferenças entre eles e obtiveram também o fator de forma e o coeficiente de atenuação linear para esses tecidos e materiais, além de apresentarem parâmetros para caracterizar seus perfis de espalhamento, tais como posição e altura do pico e largura à meia altura.

Poletti et al. (2002c) apresentaram, ainda, um método de correção de dados experimentais para se obter a seção de choque diferencial de espalhamento de materiais amorfos, considerando efeitos de polarização do feixe, múltiplo espalhamento, atenuação, geometria, dentre outros fatores. E foram apresentadas novas comparações (2004) entre tecidos mamários, muscular e materiais equivalentes. Os resultados mostraram que os perfis de espalhamento de tecidos humanos e materiais equivalentes apresentam diferenças significativas.

Para obter os perfis de espalhamento coerente para tecidos mamários humanos normais e neoplásicos, útero e rim, Castro et al. (2005) utilizaram radiação síncrotron. Mediram-se amostras pareadas, ou seja, amostra de tecido tumoral juntamente com outra amostra contendo o tecido sadio circundante a este tumoral, comparando os perfis de espalhamento de cada amostra com suas respectivas classificações histológicas.

Assim como Tartari et al. (1997a), Cunha et al. (2006) também utilizaram um feixe de raios X monoenergético de 8,04 keV gerado por um tubo de raios X com ânodo de cobre (Cu), porém com um monocromador de Si(111), além de um detector cintilador de NaI(Tl). Mediram o perfil de espalhamento de tecidos mamário normais e malignos, aplicando análise de discriminante, e foi possível classificar corretamente 97% das amostras analisadas.

Oliveira et al. (2008) utilizaram um difratômetro comercial para obter os perfis de espalhamento de amostras histopatologicamente classificadas como tecido normal, neoplasia benigna e maligna, e descreveram os procedimentos para corrigir tais perfis medidos. Além disso, aplicou-se análise multivariada nestes perfis corrigidos, obtendo-se uma sensibilidade de 95,6% e uma

especificidade de 82,3% para o método na distinção entre tecido normal e neoplásico.

Os perfis de espalhamento de amostras de tecidos mamários normais e neoplásicos foram determinados por Conceição et al. (2010a), utilizando radiação síncrotron. Destes perfis, extraíram-se parâmetros que foram submetidos à análise de discriminante, dos quais destaca-se a razão entre a intensidade dos picos posicionados em $19,8 \text{ nm}^{-1}$ e $13,9 \text{ nm}^{-1}$ e a largura à meia altura, constituindo-se parâmetros significantes e permitindo classificar corretamente todas as amostras de neoplasia benigna. Além disso, Conceição et al. (2010b) aplicaram a análise de discriminante nos perfis de espalhamento na região de WAXS, tomando como variável todo valor de momento transferido medido e, com isso, construíram um modelo de diagnóstico que classificou corretamente 91,5% das 106 amostras medidas.

Após essa revisão geral da literatura, procedeu-se para a metodologia, resultados e respectivas análises.

4 METODOLOGIA

4.1 VISÃO GERAL DA METODOLOGIA

4.1.1 Construção de *phantoms* virtuais

Neste trabalho, foram analisados modelos de *phantoms* com uma inserção cilíndrica (Figura 20) e duas inserções (Figura 21). O cilindro externo possui 4 mm de diâmetro e, no primeiro caso, a inserção consiste de um cilindro de 1 mm de diâmetro, com seu eixo centralizado ao externo. No segundo caso, foram inseridos dois cilindros internos com diâmetro de 1 mm cada. Esses cilindros das Figuras 16 e 17 são chamados de *phantoms* virtuais, pois foram construídos apenas em nível computacional, para as simulações.

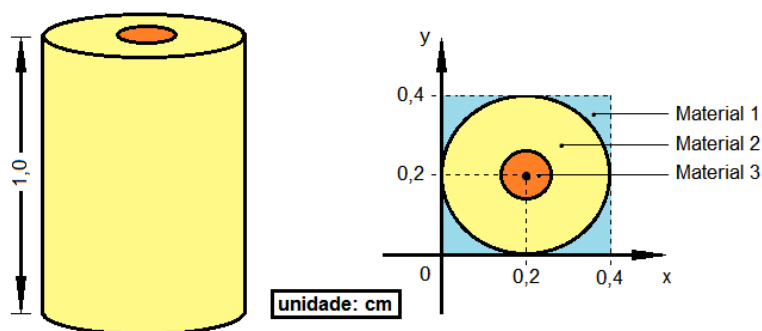


Figura 20 – Esquema representativo (sem escala) da geometria do *phantom* 1, que possui um cilindro externo com um cilindro interno.

Fonte: Autoria própria.

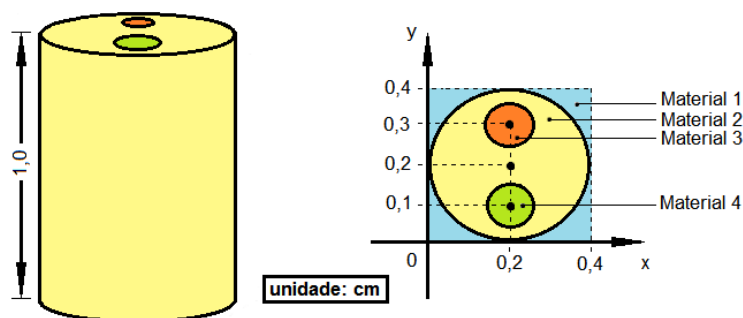


Figura 21 – Esquema representativo (sem escala) da geometria do *phantom* 2, que possui um cilindro externo com dois cilindros internos.

Fonte: Autoria própria.

Optou-se por denominar os *phantoms* de “*phantom 1*” e “*phantom 2*”, para referenciar o modelo da Figura 20, que possui apenas um cilindro interno, e para referenciar o modelo da Figura 21, que possui dois cilindros internos, respectivamente. Para todas as simulações executadas neste trabalho, o Material 1 foi ar e o Material 2 foi PMMA.

Para o *phantom 1*, foram analisados os seguintes materiais na inserção interna (Material 3):

- tecido adiposo;
- água;
- carcinoma;
- dimetilformamida;
- etanol;
- glicerol;
- nylon.

Para o *phantom 2*, foram analisadas as seguintes combinações nos cilindros internos:

- tecido adiposo e carcinoma;
- água e nylon;
- dimetilformamida e glicerol;
- etanol e glicerol.

A escolha dos materiais se deve ao fato de parte serem tecidos mamários e do restante representarem tecidos equivalentes aos tecidos mamários.

4.1.2 Escolha dos materiais

Tecidos adiposos são essencialmente compostos de células ricas em carbono. Assim, o etanol e o dimetilformamida foram os compostos escolhidos para simular tecidos adiposos, por apresentarem grande quantidade de carbono em sua proporção em massa e por sua similaridade de atenuação e aspecto radiográfico com tecidos mamários adiposos (BADELLI, 2017).

Para simular tecidos fibroglandulares foi escolhido o PMMA, por apresentar um valor de coeficiente de atenuação similar aos dos tecidos fibroglandulares da mama e por ser um material equivalente sólido que permite a inserção de outros materiais equivalentes, possibilitando estudos práticos do *phantoms* virtuais em questão. Além disso, o PMMA é um material equivalente mamário muito utilizado em *phantoms* de mama comerciais, utilizados em testes de calibração e de qualidade de mamógrafos. Também foi escolhido o nylon para simular tecidos fibroglandulares, conforme o relatório 44 da ICRU (OLIVEIRA et al., 2012).

O glicerol foi escolhido para simular carcinomas, devido a sua composição química e devido a similaridades de atenuação e aspecto radiográfico do mesmo com um carcinoma mamário (BADELLI, 2017).

A água foi escolhida por estar presente em todos os tecidos mamários e também em neoplasias.

Todos os materiais equivalentes foram escolhidos por apresentarem características de atenuação e espalhamento similares aos tecidos mamários (AL-BAHRI e SPYROU, 1998).

4.1.3 Posicionamento da fonte de raios X

Para as simulações consideraram-se as posições da fonte do feixe de elétrons:

- conforme a Figura 22, para o caso de haver um cilindro interno;
- conforme a Figura 23 e a Figura 24, para os casos de haver dois cilindros internos.

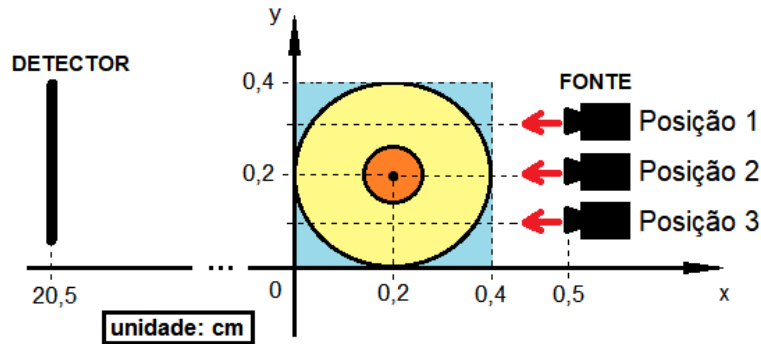


Figura 22 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X, na altura $z = 0,5$ cm, para o *phantom 1*.

Fonte: Autoria própria.

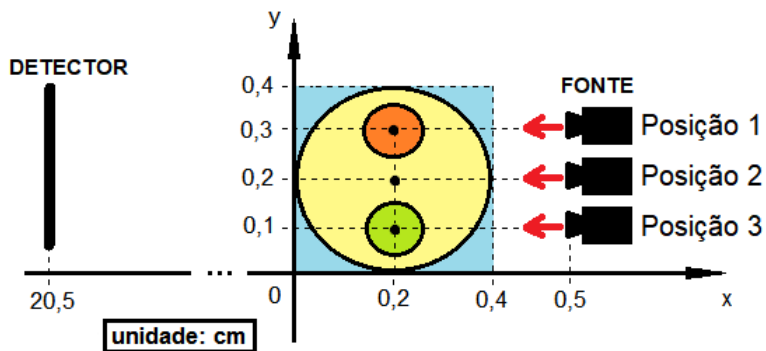


Figura 23 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X, na altura $z = 0,5$ cm, para o *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

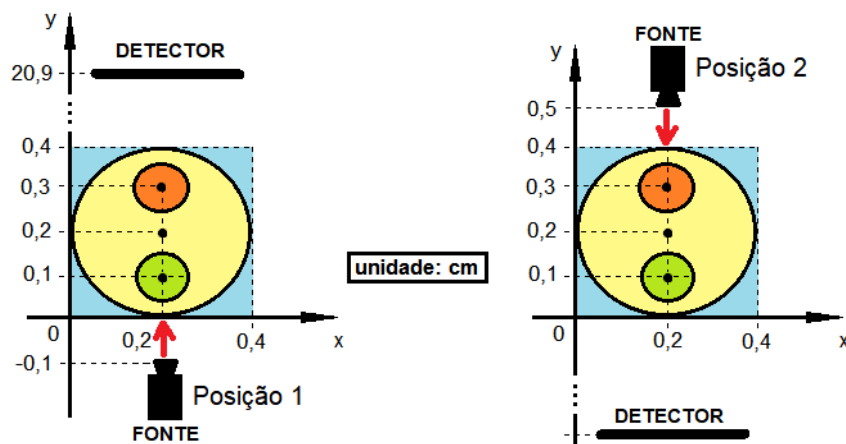


Figura 24 – Vista superior do posicionamento da fonte do feixe de fótons de raios X girada em 90° em torno do eixo z , na altura $z = 0,5$ cm, para o *phantom 2*. Na posição 1 (com fonte para cima) à esquerda e na posição 2 (com fonte para baixo) à direita.

Fonte: Autoria própria.

É importante dizer que a altura da posição da fonte no eixo z foi sempre em $z = 0,5$ cm. Para ilustrar melhor o eixo z, pode-se ver a Figura 25, a seguir.

4.1.4 Obtenção dos padrões de espalhamento

A Figura 25 demonstra o arranjo utilizado nas simulações para a geração do padrão de espalhamento de raios X. O feixe de raios X incide em um alvo, no caso, os *phantoms* 1 e 2.

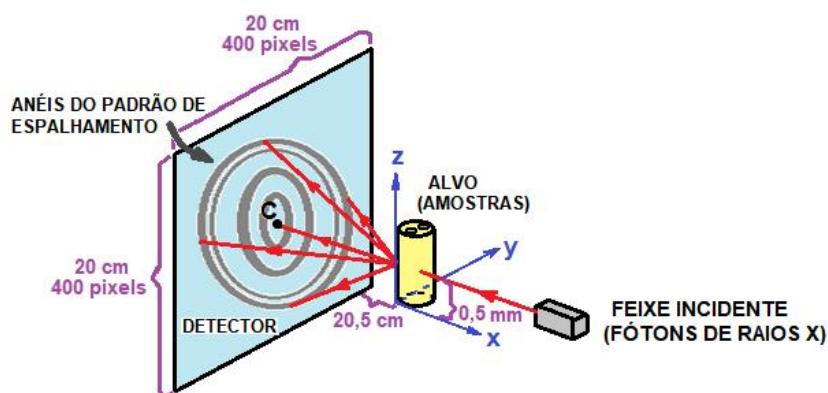


Figura 25 – Montagem experimental simulada no *software* MC-GPU.

Fonte: Autoria própria, adaptado de Gürsoy et al. (2015).

O detector utilizado possui área efetiva de 400 cm^2 , contendo 400 pixels por 400 pixels. Os eixos xyz se mantêm fixos. O detector é posicionado automaticamente pelo programa, tendo como base a localização da fonte do feixe de fótons, de maneira que o feixe incidente incida diretamente sobre o centro C do detector, conforme a Figura 25.

4.1.5 Softwares utilizados

As simulações foram realizadas no Sistemas Operacionais Ubuntu e Windows, com o auxílio dos seguintes *softwares*:

1. PENELOPE 2006, que gera os arquivos de materiais a serem utilizados no MC-GPU;
2. MC-GPU (versão 2012), que se utiliza do método Monte Carlo para determinar o padrão de espalhamento baseado nas probabilidades que já se tem para, assim, efetuar as análises da realização do espalhamento Rayleigh nas condições prescritas em seus arquivos de entrada;
3. MATLAB® R2017b, que converte o arquivo com os dados da imagem para uma imagem em 8 bits, com 400 por 400 pixels;
4. fit2d beta V18.002, que integra as imagens geradas no MATLAB® R2017b para obter os espectros de cada combinação.

Esses *softwares* foram utilizados nessa ordem, conforme a Figura 26, sendo que os procedimentos realizados em cada *software* estão descritos a seguir, nos tópicos 4.2 a 4.5, conforme a numeração de cada etapa.

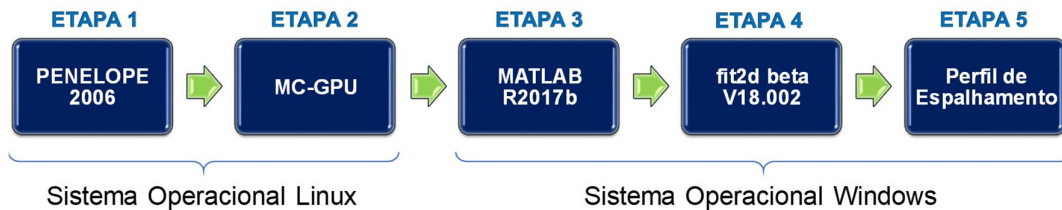


Figura 26 – Organograma de utilização dos *softwares* até a etapa de obtenção do perfil de espalhamento.

Fonte: Autoria própria.

4.2 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE PENELOPE (ETAPA 1)

O *software* PENELOPE, versão 2006, serve para gerar os arquivos de materiais, ou seja, gera arquivos com a extensão requerida pelo *software* MC-GPU. Nele, é possível definir o material que será utilizado na análise e se será analisado com interferência molecular, conforme a Figura 27.

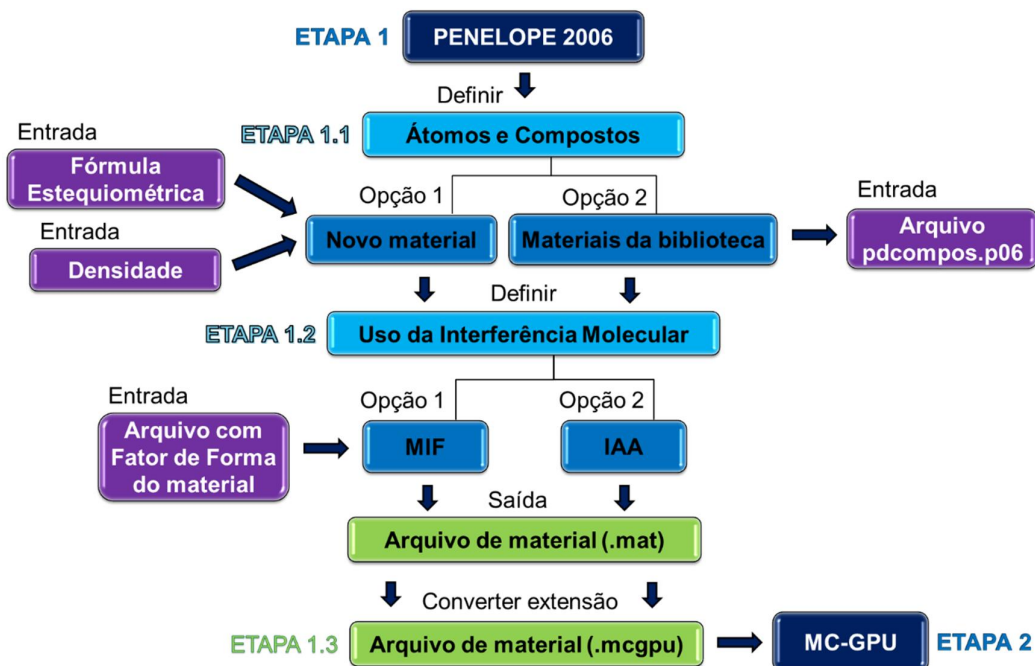


Figura 27 – Organograma de procedimentos realizados no *software* PENELOPE 2006.

Fonte: Autoria própria.

Nesta etapa, que está mais detalhada no Apêndice A, são requisitados dados a respeito de cada um dos materiais necessários para a análise, com o auxílio do programa “material_with_MIF.x”. Basicamente, duas decisões importantes precisam ser definidas no programa:

- Etapa 1.1: O usuário decide se informará novos compostos ou se utilizará átomos/compostos já prontos da biblioteca do programa;
- Etapa 1.2: O usuário decide se irá analisar os dados com Função de Interferência Molecular (da sigla em inglês, “MIF”) ou com Modelo Atômico Independente (da sigla em inglês, “IAA”).

Foram criados os novos compostos (Etapa 1.1, opção 1):

- carcinoma, com fórmula molecular $N_1C_{11}H_{28}O_{15}$;
- PMMA, com fórmula molecular $C_5O_2H_8$.

E da biblioteca do *software* (Etapa 1.1, opção 2) foram utilizados os compostos:

- água
- ar
- dimetilformamida
- etanol
- glicerol
- nylon
- tecido adiposo

É possível realizar análises com o uso da Função de Interferência Molecular (MIF), conforme explicado anteriormente (Etapa 1.2, opção 1). Nesse caso, é necessário preparar-se um arquivo com a extensão “.dat” com os dados do Fator de Forma do respectivo material, determinados experimentalmente. O arquivo de saída possui extensão “.mat”. Dessa maneira, foram obtidos os materiais:

- MIF_adiposo.mat
- MIF_agua.mat
- MIF_ar.mat
- MIF_carcinoma.mat
- MIF_dimetilformamida.mat
- MIF_etanol.mat
- MIF_glicerol.mat
- MIF_nylon.mat
- MIF_PMMA.mat

Mas também é possível realizar análise com o uso do Modelo Atômico Independente (IAA), conforme explicado anteriormente (Etapa 1.2, opção 2). Nesse caso, não é necessário preparar arquivos prévios, pois não é considerada a interferência molecular. Analogamente, o arquivo de saída possui extensão “.mat”. Dessa maneira, foram obtidos os materiais:

- IAA_adiposo.mat
- IAA_agua.mat
- IAA_ar.mat
- IAA_carcinoma.mat
- IAA_dimetilformamida.mat
- IAA_etanol.mat
- IAA_glicerol.mat
- IAA_nylon.mat
- IAA_PMMA.mat

Na Etapa 1.3, é preciso converter a extensão “.mat” para a extensão “.mcgpu”, com o auxílio do programa chamado “MC-GPU-create-material-data.x”.

Assim, nessa fase foram obtidos os seguintes materiais:

- MIF_adiposo.mcgpu
- MIF_agua.mcgpu
- MIF_ar.mcgpu
- MIF_carcinoma.mcgpu
- MIF_dimetilformamida.mcgpu
- MIF_etanol.mcgpu
- MIF_glicerol.mcgpu
- MIF_nylon.mcgpu
- MIF_PMMA.mcgpu
- IAA_adiposo.mcgpu
- IAA_agua.mcgpu
- IAA_ar.mcgpu
- IAA_carcinoma.mcgpu
- IAA_dimetilformamida.mcgpu
- IAA_etanol.mcgpu
- IAA_glicerol.mcgpu
- IAA_nylon.mcgpu
- IAA_PMMA.mcgpu

É interessante ressaltar que não é preciso recriar os arquivos de materiais para cada uma das combinações, pois estes podem ser reutilizados de acordo com cada combinação.

4.3 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MC-GPU (ETAPA 2)

O *software* MC-GPU, versão 2012, serve para gerar o arquivo dos dados obtidos por espalhamento elástico (Rayleigh), conforme a Figura 28.

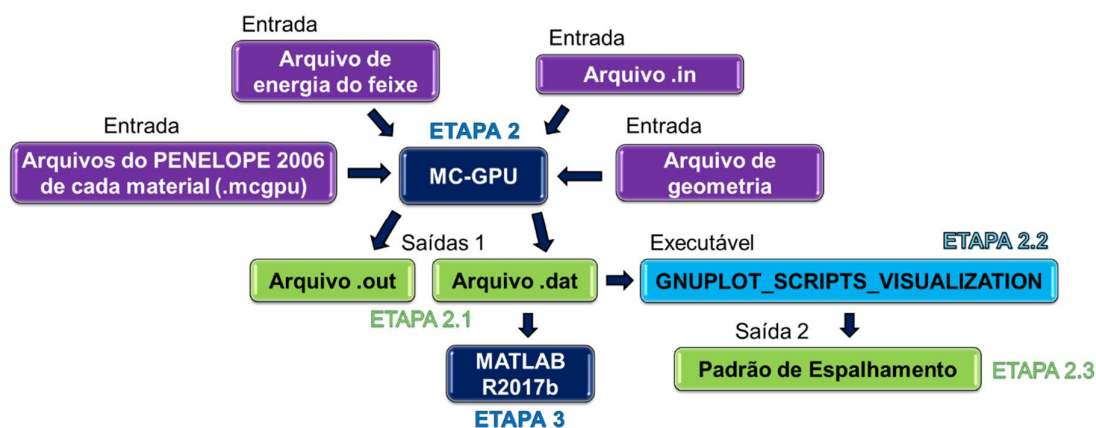


Figura 28 – Organograma de procedimentos realizados no *software* MC-GPU.

Fonte: A autoria própria.

Um dos procedimentos a ser realizado é programar o arquivo da geometria que será analisada. A geometria utilizada é cilíndrica, conforme pode-

se perceber nas figuras iniciais deste capítulo de “Metodologia” (Figura 20 e Figura 21). Assim, essa geometria precisou ser programada em Linguagem C para que o *software* do MC-GPU conseguisse entendê-la.

Tal código foi programado a partir do conceito de circunferência, descrito no capítulo de “Fundamentação Teórica” deste trabalho. Os códigos foram feitos para duas configurações: *phantom 1* (Figura 20); e *phantom 2* (Figura 21). Esses códigos podem ser vistos em anexo (Anexo B).

Também em anexo (Anexo A) pode-se ver o arquivo com extensão “.in” para o caso da simulação realizada na combinação com água e nylon. Alguns trechos importantes estão destacados no anexo propositalmente para localizá-los mais facilmente.

Seguindo a ordem com que os dados estão destacados, deve-se saber que, nessa simulação tomada como exemplo:

- o feixe utilizado possuía $1,0 \cdot 10^{11}$ eventos (fótons de raios X);
- deve-se informar o arquivo com a especificação da energia do feixe;
- a posição da fonte estava em $x = 0,5$ cm, $y = 0,3$ cm, $z = 0,5$ cm;
- a direção da fonte estava apontando para a direção de $x = -1$;
- o número de pixels na imagem era de 400 por 400;
- o tamanho da imagem, ou seja, a figura de saída, teria 20 por 20 cm;
- a distância da fonte até o detector foi de 21 cm;
- todos os materiais criados no *software* MC-GPU necessários para a simulação foram listados em seus respectivos formatos compactados. Para compactar os arquivos bastou escrever “.gz” posteriormente a extensão do arquivo, renomeando o mesmo.

Todos esses tópicos foram os mesmos para todas as simulações, com exceção dos itens a respeito da posição e da direção da fonte, que estão descritos cada qual com seus respectivos Resultados em capítulo próprio.

Portanto, de acordo com o Apêndice B, que detalha melhor os procedimentos realizados, nesta Etapa 2 deve-se ter os seguintes arquivos numa única pasta:

- o arquivo de energia com extensão “.spc”, que, no caso, descreve um feixe monoenergético de 8,54 keV;
- o arquivo com extensão “.in”, com os parâmetros de entrada;
- o arquivo de geometria em sua versão compactada;
- os arquivos compactados dos materiais a serem simulados.

Para se utilizar o MC-GPU, portanto, deve-se executar primeiramente o arquivo “MC-GPU_v1.3_CPU.x”, abrindo o terminal na pasta da combinação que se deseja simular. O programa irá mostrar algumas informações na tela logo que iniciar a simulação, porém, no decorrer do processo não é possível saber como a simulação está procedendo ou se ocorreu algo indesejável no processo.

Cada simulação demorou entre 5 e 31 horas aproximadamente, sendo que a maioria levou cerca de 9 horas para concluir toda a simulação. E, apenas ao final da simulação é que é possível saber se ela foi bem-sucedida. Os tempos de simulação de cada amostra estão apresentados no capítulo dos Resultados. Mas o que importa ressaltar é que, devido a isso, algumas simulações podem ser perdidas ao final de um dia inteiro de simulação, por exemplo.

Se realizado com sucesso, são criados arquivos com extensões “.dat” e “.out” (Etapa 2.1). O arquivo “.out” informa se tudo ocorreu com sucesso, assim como também aparece na tela do terminal, e descreve alguns dados, como tempo de simulação, por exemplo. Já o arquivo “.dat” é onde estão os dados em valores numéricos do espalhamento elástico (Rayleigh), além de outros espalhamentos, que não são foco do presente trabalho. Esse arquivo “.dat” é o arquivo necessário para geração das imagens do padrão de espalhamento.

Para gerar as imagens dos padrões de espalhamento (Etapa 2.2) do arquivo com extensão “.dat”, utiliza-se o programa “gnuplot_images_MC-GPU.gpl” e são gerados arquivos com extensão “.png” para a combinação em análise (Etapa 2.3). O presente trabalho tem foco apenas na imagem produzida por efeito Rayleigh, ou seja, no arquivo “mc-gpu_image_Rayleigh.png”.

Quando com o *phantom* 1 os procedimentos deste tópico 4.3 foram repetidos para cada uma das combinações em $y = 0,1$ cm, para cada uma em $y = 0,2$ cm e para cada uma em $y = 0,3$ cm, devido a posição dos materiais,

conforme explicado anteriormente na Figura 22. Os arquivos de saída gerados com extensão “.dat” foram:

- MIF_adiposo.dat
- MIF_agua.dat
- MIF_carcinoma.dat
- MIF_dimetilformamida.dat
- MIF_etanol.dat
- MIF_glicerol.dat
- MIF_nylon.dat
- IAA_adiposo.dat
- IAA_agua.dat
- IAA_carcinoma.dat
- IAA_dimetilformamida.dat
- IAA_etanol.dat
- IAA_glicerol.dat
- IAA_nylon.dat

Quando com o *phantom 2*, os mesmos procedimentos foram repetidos para cada uma das combinações em $y = 0,1$ cm, para cada uma em $y = 0,2$ cm e para cada uma em $y = 0,3$ cm, devido a posição dos materiais, conforme explicado anteriormente na Figura 23. E também foram repetidos para cada uma das combinações com a fonte girada em 90° no sentido pra cima e no sentido para baixo, conforme a Figura 24. Os arquivos de saída gerados com extensão “.dat”, para cada posição da fonte, foram:

- MIF_adiposocarcinoma.dat
- MIF_aguanylon.dat
- MIF_dimetilformamidaglicerol.dat
- MIF_etanolglicerol.dat
- IAA_adiposocarcinoma.dat
- IAA_aguanylon.dat
- IAA_dimetilformamidaglicerol.dat
- IAA_etanolglicerol.dat

Vale ressaltar que cada um desses arquivos com extensão “.dat” possuíam seus respectivos arquivos chamados “mc-gpu_image_Rayleigh.png”.

4.4 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MATLAB® (ETAPA 3)

Foi elaborado um código em MATLAB®, versão R2017b, para ajustar a figura de saída do MC-GPU para realizar a integração azimutal usando o *software fit2d*, conforme o organograma na Figura 29. O arquivo de saída do MATLAB consiste de uma imagem em formato “.tiff”, com 8 bits e 400 por 400 pixels (Figura 30). Os procedimentos desta Etapa 3 estão melhor detalhados no Apêndice C.

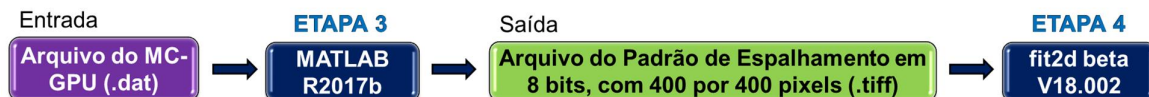


Figura 29 – Organograma de procedimentos realizados no *software* MATLAB®.

Fonte: Autoria própria.



Figura 30 – Arquivo com extensão “.tiff”, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Todos esses procedimentos desta Etapa 3 foram realizados para cada um dos arquivos com extensão .dat obtidos na etapa anterior (Etapa 2). Cada arquivo “.tiff” seguiu para a Etapa 4, descrita no tópico 4.5.

4.5 PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE fit2d (ETAPA 4)

Foi utilizado o *software* fit2d beta, versão V18.002 para integrar radialmente os padrões de espalhamento obtidos na etapa anterior (Etapa 3). Toda a Etapa 4 pode ser vista na Figura 31.



Figura 31 – Organograma de procedimentos realizados no *software* fit2d.

Fonte: Autoria própria.

Foi demarcada a área de integração do padrão de espalhamento de cada amostra, conforme os dados descritos anteriormente, estando também mais detalhados no Apêndice D.

As integrações foram realizadas azimutalmente em “Q-SPACE”. O “Q-SPACE” é o tipo de varredura utilizado na integração, o qual pode ser escrito na forma a seguir, conforme a Equação 2, apresentada anteriormente:

$$Q = q = \left(\frac{4\pi}{\lambda}\right) \text{sen}\left(\frac{2\theta}{2}\right), \text{ dado em } nm^{-1},$$

onde 2θ é o ângulo da dispersão conforme registrado no detector em relação ao feixe direto (HAMMERSLEY, 2004).

Após todas as especificações dos dados no *software* fit2d, foi então calculado e apresentado o perfil de espalhamento em análise.

Todos esses procedimentos desta Etapa 4 foram realizados para cada um dos arquivos com extensão “.tiff” obtidos na etapa anterior (Etapa 3). Os resultados finais obtidos seguiram para a Etapa 5, descrita no Capítulo 5 (Resultados e discussões), para avaliação de cada perfil de espalhamento.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 SIMULAÇÕES APRESENTADAS NA DISSERTAÇÃO

Neste trabalho, conforme descrições anteriores, apresentam-se 27 (vinte e sete) combinações de materiais, sendo 12 (doze) com IAA e 15 (quinze) com MIF.

Em cada uma dessas 12 (doze) combinações com IAA, há 7 (sete) que seguem o modelo de *phantom* 1, apresentado na Figura 22, 4 (quatro) que seguem o modelo de *phantom* 2, apresentado na Figura 23, e 1 (uma) que segue o modelo de *phantom* 2 com a fonte girada em 90°, apresentado na Figura 24.

Em cada uma das 15 (quinze) combinações com MIF, há 7 (sete) que seguem o modelo de *phantom* 1, apresentado na Figura 22, 4 (quatro) que seguem o modelo de *phantom* 2, apresentado na Figura 23, e 4 (quatro) que seguem o modelo de *phantom* 2 com a fonte girada em 90°, apresentado na Figura 24.

Nos Quadros de 1 a 6 podem-se ver todas as simulações realizadas e o tempo de execução de cada uma delas.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
IAA	Tecido Adiposo (combinação 1)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	10 h 24 min 13 s
			0,2		Tecido Adiposo	10 h 21 min 52 s
			0,3		PMMA	10 h 22 min 44 s
	Água (combinação 2)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	11 h 25 min 27 s
			0,2		Água	10 h 30 min 20 s
			0,3		PMMA	11 h 23 min 27 s
	Carcinoma (combinação 3)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	10 h 53 min 0 s
			0,2		Carcinoma	10 h 9 min 39 s
			0,3		PMMA	10 h 49 min 56 s
	Dimetilformamida (combinação 4)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	8 h 58 min 5 s
			0,2		Dimetilformamida	8 h 39 min 18 s
			0,3		PMMA	8 h 58 min 11 s
	Etanol (combinação 5)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	8 h 58 min 30 s
			0,2		Etanol	8 h 41 min 18 s
			0,3		PMMA	8 h 57 min 12 s
	Glicerol (combinação 6)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 34 min 3 s
			0,2		Glicerol	8 h 57 min 32 s
			0,3		PMMA	9 h 33 min 23 s
	Nylon (combinação 7)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	8 h 57 min 52 s
			0,2		Nylon	8 h 39 min 25 s
			0,3		PMMA	8 h 57 min 5 s

Quadro 1 – Combinações realizadas no *phantom* 1, simuladas com IAA.

Fonte: Autoria própria.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
IAA	Tecido Adiposo e Carcinoma (combinação 8)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Tecido Adiposo	10 h 8 min 27 s
			0,2		PMMA	8 h 52 min 51 s
			0,3		Carcinoma	9 h 14 min 17 s
	Água e Nylon (combinação 9)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Água	9 h 45 min 36 s
			0,2		PMMA	9 h 18 min 57 s
			0,3		Nylon	10 h 0 min 56 s
	Dimetilformamida e Glicerol (combinação 10)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Dimetilformamida	10 h 11 min 9 s
			0,2		PMMA	9 h 14 min 17 s
			0,3		Glicerol	9 h 32 min 33 s
	Etanol e Glicerol (combinação 11)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Etanol	10 h 11 min 4 s
			0,2		PMMA	9 h 9 min 11 s
			0,3		Glicerol	9 h 32 min 55 s

Quadro 2 – Combinações realizadas no *phantom 2*, simuladas com IAA.

Fonte: Autoria própria.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
MIF	Tecido Adiposo (combinação 12)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	8 h 39 min 16 s
			0,2		Tecido Adiposo	8 h 43 min 33 s
			0,3		PMMA	9 h 0 min 6 s
	Água (combinação 13)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 25 min 5 s
			0,2		Água	9 h 8 min 26 s
			0,3		PMMA	9 h 48 min 39 s
	Carcinoma (combinação 14)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	16 h 37 min 6 s
			0,2		Carcinoma	24 h 10 min 49 s
			0,3		PMMA	14 h 49 min 55 s
	Dimetilformamida (combinação 15)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 4 min 1 s
			0,2		Dimetilformamida	8 h 33 min 36 s
			0,3		PMMA	9 h 1 min 53 s
	Etanol (combinação 16)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 4 min 51 s
			0,2		Etanol	8 h 26 min 44 s
			0,3		PMMA	9 h 1 min 29 s
	Glicerol (combinação 17)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 41 min 51 s
			0,2		Glicerol	8 h 32 min 26 s
			0,3		PMMA	9 h 39 min 11 s
	Nylon (combinação 18)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	PMMA	9 h 5 min 51 s
			0,2		Nylon	8 h 38 min 13 s
			0,3		PMMA	8 h 55 min 30 s

Quadro 3 – Combinações realizadas no *phantom 1*, simuladas com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
MIF	Tecido Adiposo e Carcinoma (combinação 19)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Tecido Adiposo	11 h 18 min 36 s
			0,2		PMMA	12 h 18 min 2 s
			0,3		Carcinoma	26 h 57 min 1 s
	Água e Nylon (combinação 20)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Água	5 h 33 min 25 s
			0,2		PMMA	7 h 36 min 27 s
			0,3		Nylon	12 h 3 min 30 s
	Dimetilformamida e Glicerol (combinação 21)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Dimetilformamida	5 h 50 min 42 s
			0,2		PMMA	7 h 32 min 7 s
			0,3		Glicerol	11 h 21 min 4 s
	Etanol e Glicerol (combinação 22)	0,5	0,1	-x (para esquerda)	Etanol	5 h 49 min 26 s
			0,2		PMMA	7 h 31 min 10 s
			0,3		Glicerol	11 h 21 min 30 s

Quadro 4 – Combinações realizadas no *phantom 2*, simuladas com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
IAA	Água e Nylon (combinação 23)	0,2	-0,1	+y (para cima)	Água	10 h 8 min 8 s
		0,2	0,5	-y (para baixo)	Nylon	11 h 9 min 11 s

Quadro 5 – Combinação realizada no *phantom* 1, com a fonte girada em 90°, simuladas com IAA.

Fonte: Autoria própria.

Modo de Simulação	Combinação Principal	Posição da Fonte		Direção da Fonte	Material em Foco	Tempo de Simulação
		x (mm)	y (mm)			
MIF	Tecido Adiposo e Carcinoma (combinação 24)	0,2	-0,1	+y (para cima)	Tecido Adiposo	27 h 22 min 11 s
		0,2	0,5	-y (para baixo)	Carcinoma	30 h 41 min 35 s
	Água e Nylon (combinação 25)	0,2	-0,1	+y (para cima)	Água	10 h 43 min 42 s
		0,2	0,5	-y (para baixo)	Nylon	11 h 45 min 19 s
	Dimetilformamida e Glicerol (combinação 26)	0,2	-0,1	+y (para cima)	Dimetilformamida	11 h 24 min 21 s
		0,2	0,5	-y (para baixo)	Glicerol	10 h 51 min 49 s
	Etanol e Glicerol (combinação 27)	0,2	-0,1	+y (para cima)	Etanol	11 h 26 min 43 s
		0,2	0,5	-y (para baixo)	Glicerol	10 h 59 min 41 s

Quadro 6 – Combinações realizadas no *phantom* 2, com a fonte girada em 90°, simuladas com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Para facilitar a leitura, os títulos das simulações deste Capítulo 5, apresentam os nomes dos materiais utilizados internamente ao cilindro de PMMA, de acordo com os Quadros de 1 a 6, na coluna “Combinação Principal”. É importante lembrar que todos os cilindros internos possuíam o mesmo tamanho de 1 mm de diâmetro, independentemente de serem dois cilindros internos ou apenas um, e que também a altura da fonte de fótons foi sempre de $z = 0,5$ cm.

Esta etapa de resultados constitui a Etapa 5 mencionada na Figura 26, anteriormente, que se trata dos perfis de espalhamento. As figuras da esquerda são sempre dos arquivos “mc-gpu_image_Rayleigh.png”, obtidos na Etapa 2, mais detalhadas no Apêndice B, representando o espalhamento Rayleigh, mostrado em raios X no eixo das ordenadas por eV/cm^2 no eixo das abscissas. E as figuras da direita são sempre dos arquivos obtidos no *software* fit2d, mostrado em “q” (dado em nm^{-1}) no eixo das ordenadas por intensidade de fótons no eixo das abscissas, analogamente ao exemplo apresentado na Etapa 4 e no Apêndice D.

5.2 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM UM CILINDRO MENOR INTERNO

As Combinações de 1 a 7 possuem um cilindro externo de PMMA com um cilindro menor interno de materiais diversos, conforme a Figura 22 (*phantom 1*), mostrada anteriormente, e foram feitas com IAA.

5.2.1 Tecido adiposo (Combinação 1)

O material interno da Combinação 1 é tecido adiposo. Na Figura 32, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 33, o resultado para tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm).

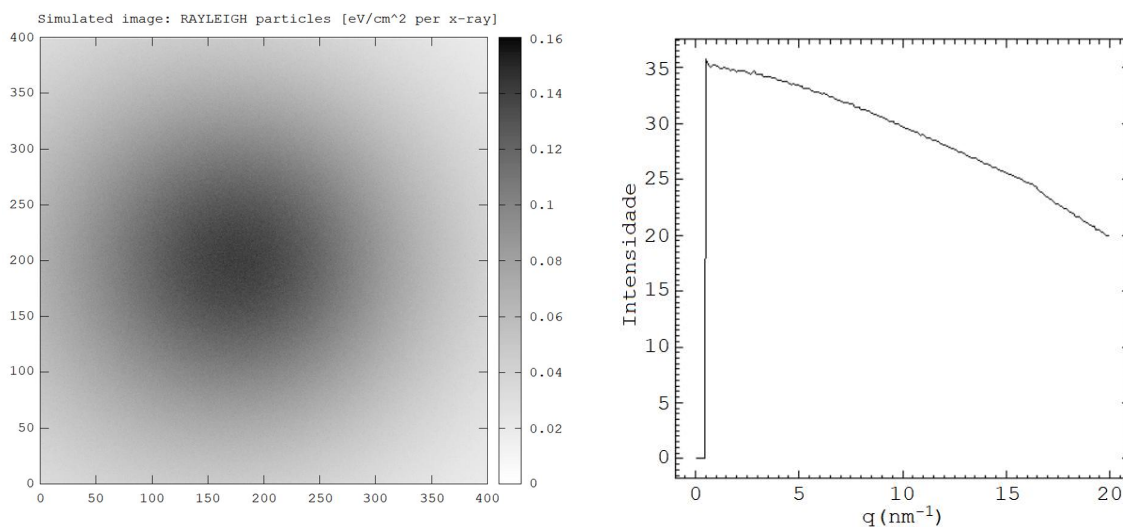


Figura 32 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 1.

Fonte: Autoria própria.

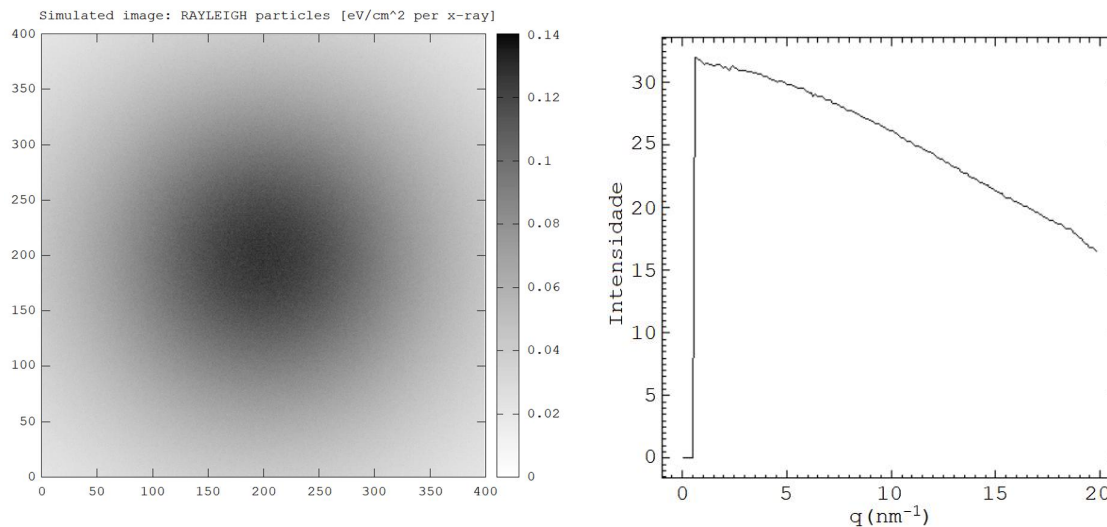


Figura 33 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 1.

Fonte: Autoria própria.

5.2.2 Água (Combinação 2)

O material interno da Combinação 2 é água. Na Figura 34, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 35, o resultado para água (fonte em $y = 0,2$ mm).

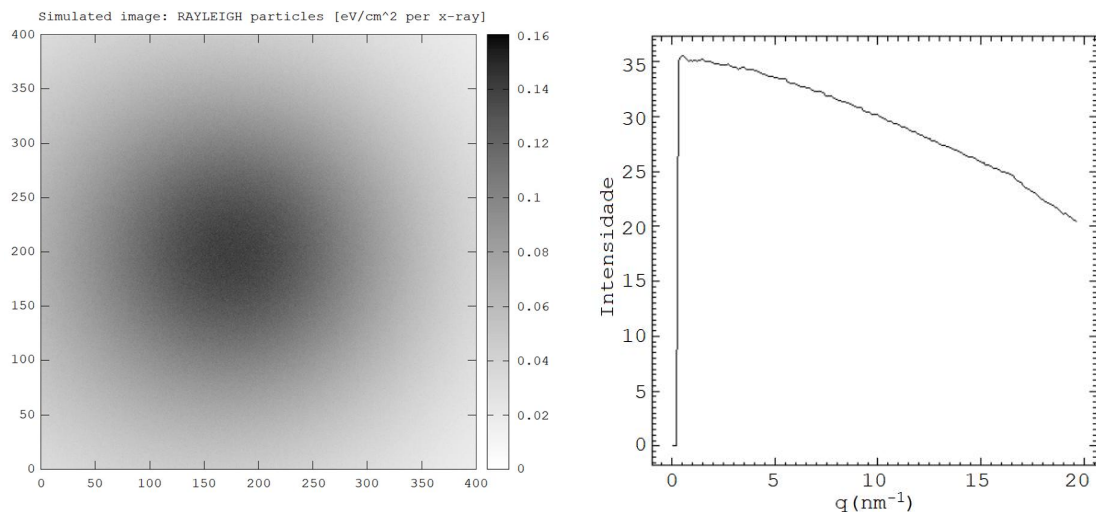


Figura 34 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 2.

Fonte: Autoria própria.

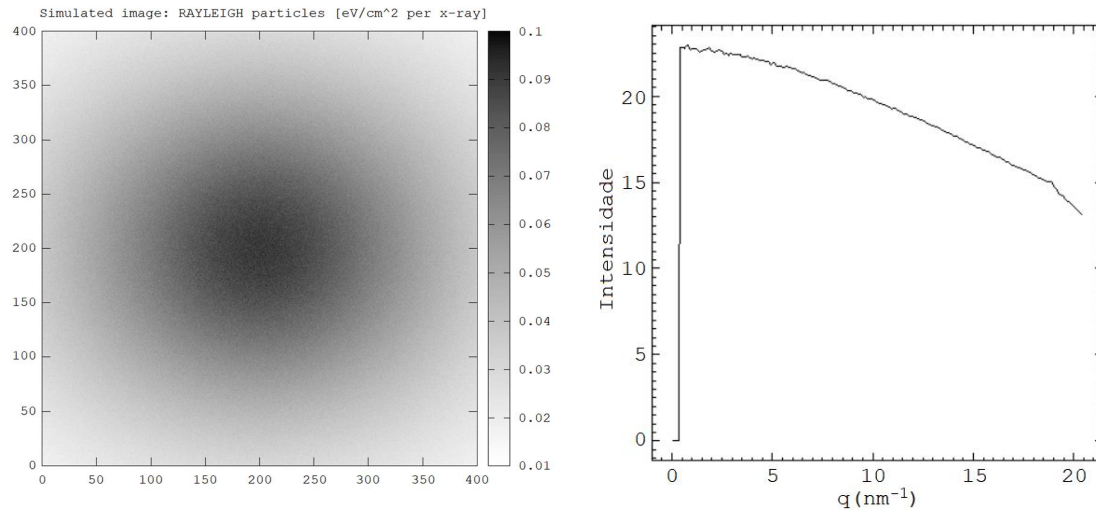


Figura 35 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 2.

Fonte: Autoria própria.

5.2.3 Carcinoma (Combinação 3)

O material interno da Combinação 3 é carcinoma. Na Figura 36, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 37, o resultado para carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm).

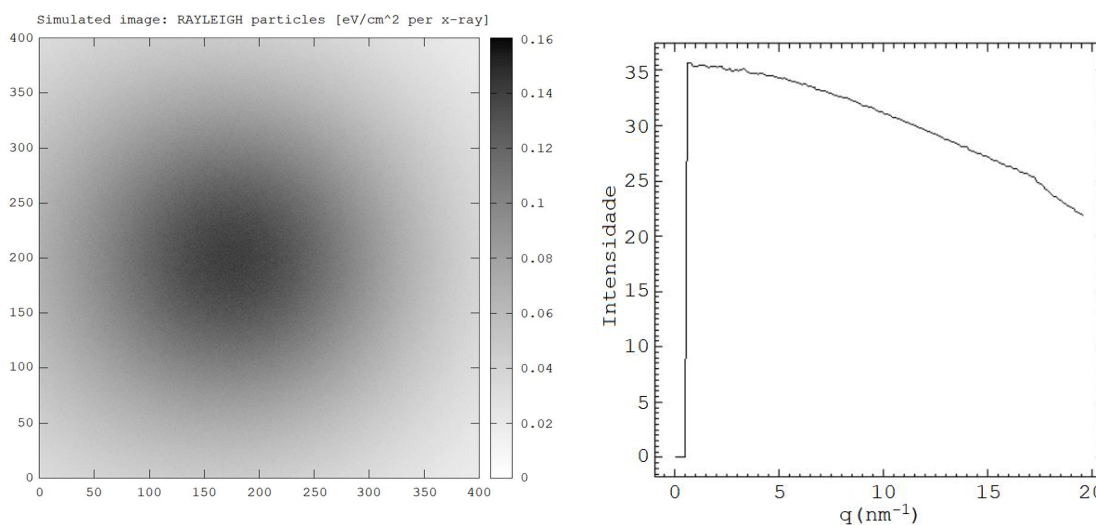


Figura 36 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 3.

Fonte: Autoria própria.

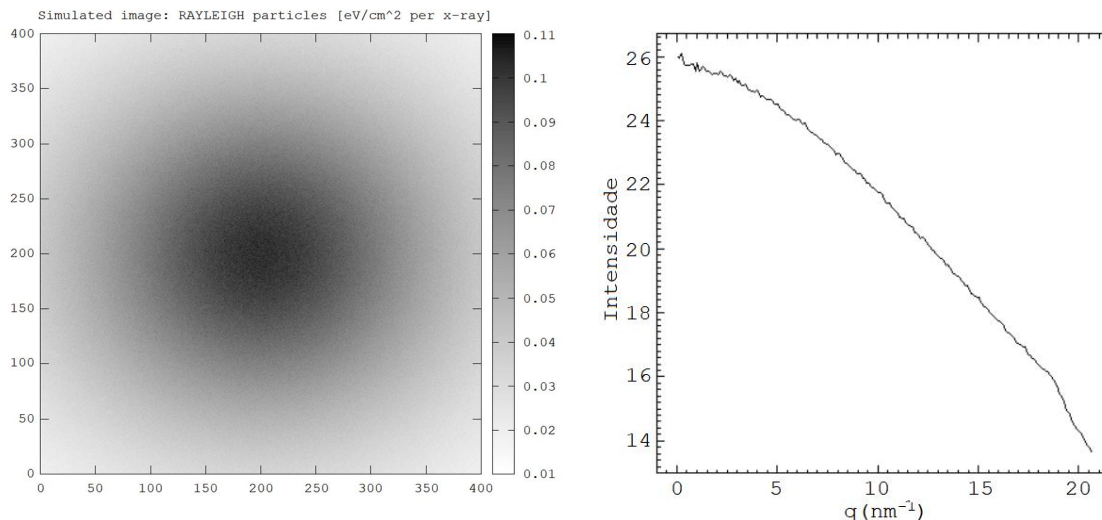


Figura 37 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 3.

Fonte: Autoria própria.

5.2.4 Dimetilformamida (Combinação 4)

O material interno da Combinação 4 é dimetilformamida. Na Figura 38, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 39, o resultado para dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm).

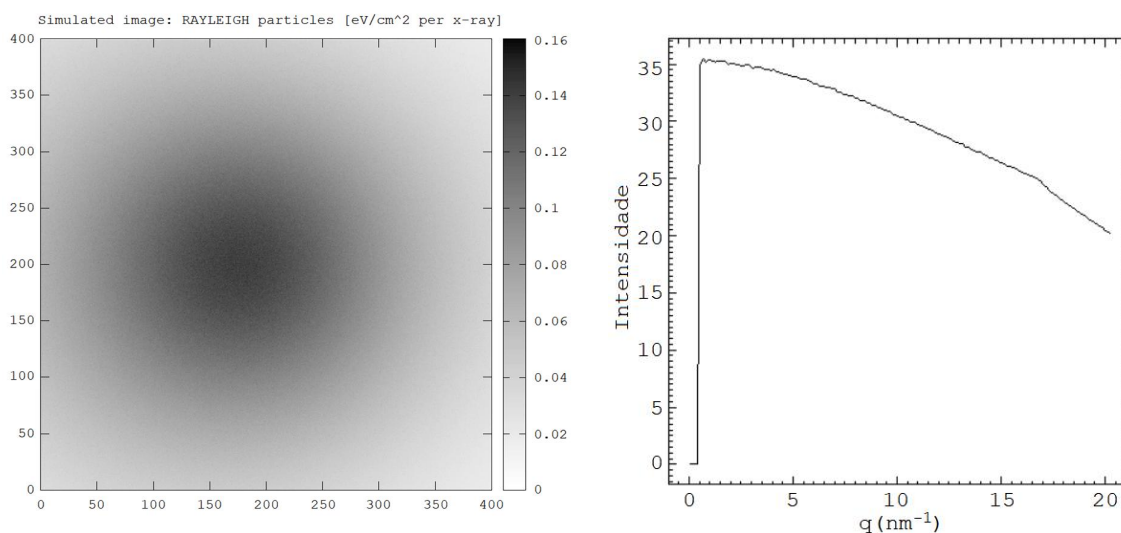


Figura 38 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 4.

Fonte: Autoria própria.

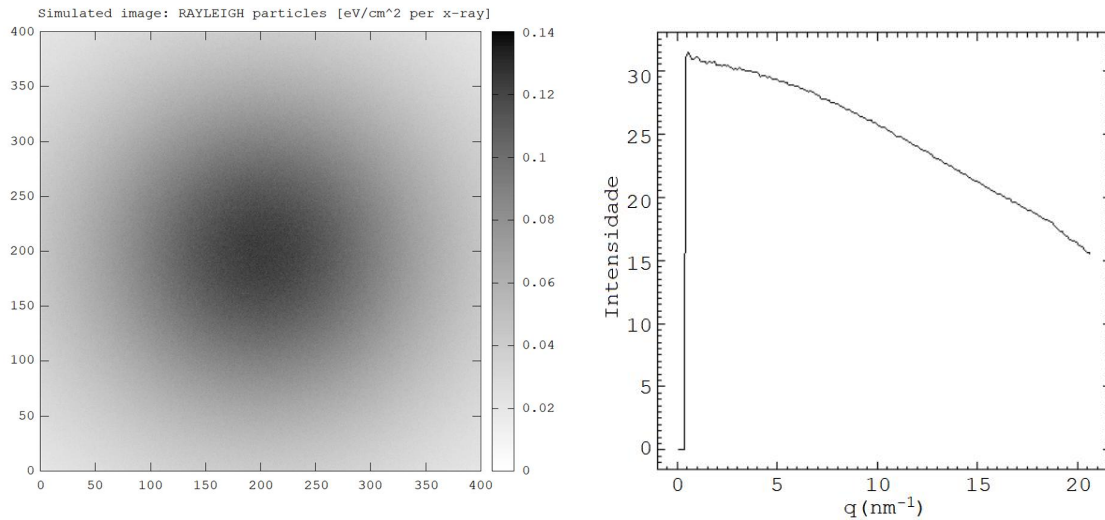


Figura 39 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 4.

Fonte: Autoria própria.

5.2.5 Etanol (Combinação 5)

O material interno da Combinação 5 é etanol. Na Figura 40, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 41, o resultado para etanol (fonte em $y = 0,2$ mm).

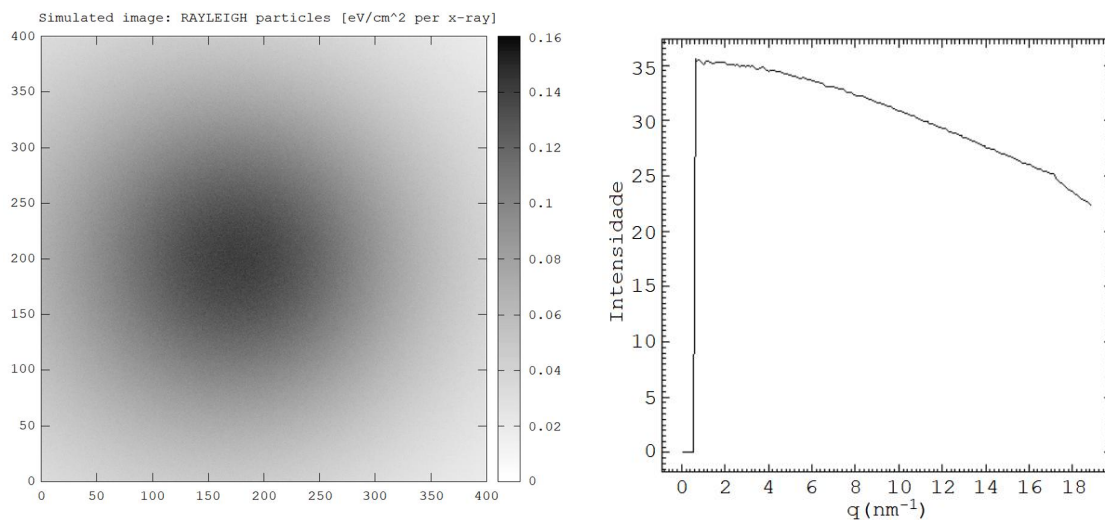


Figura 40 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 5.

Fonte: Autoria própria.

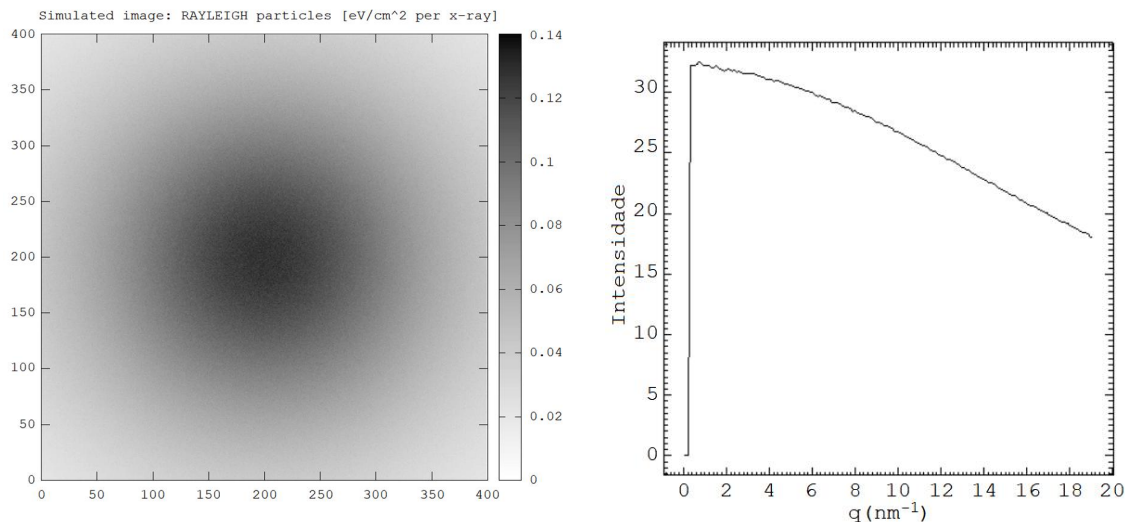


Figura 41 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 5.

Fonte: Autoria própria.

5.2.6 Glicerol (Combinação 6)

O material interno da Combinação 6 é glicerol. Na Figura 42, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 43, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm).

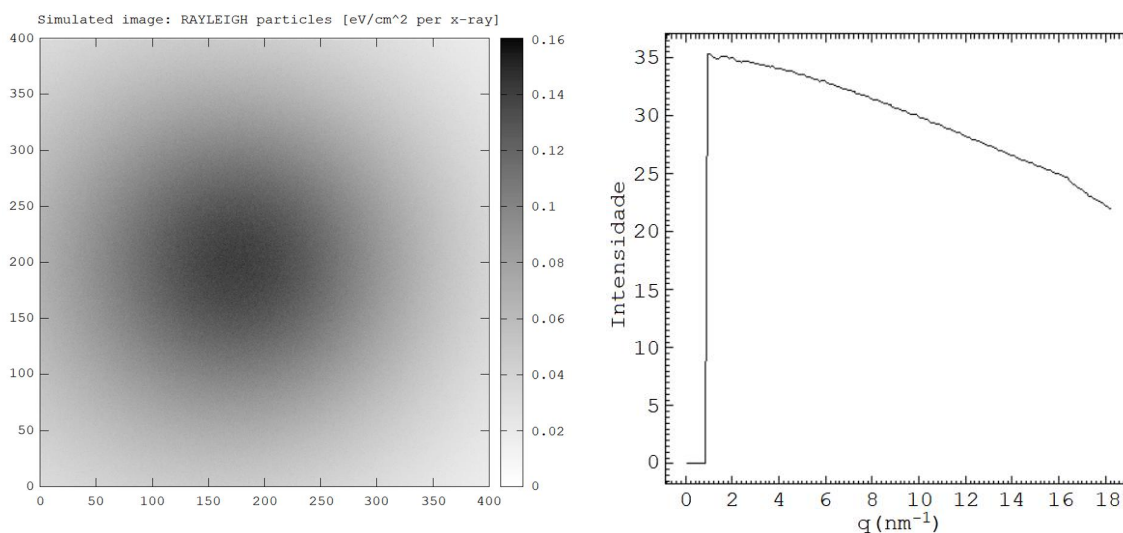


Figura 42 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 6.

Fonte: Autoria própria.

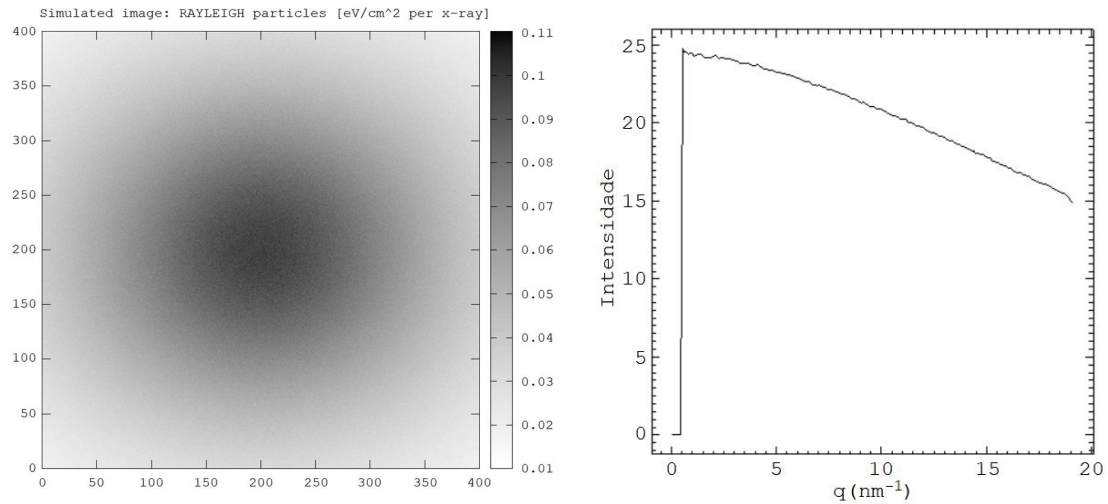


Figura 43 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 6.

Fonte: Autoria própria, com o auxílio dos *softwares* de simulação.

5.2.7 Nylon (Combinação 7)

O material interno da Combinação 7 é nylon. Na Figura 44, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 45, o resultado para nylon (fonte em $y = 0,2$ mm).

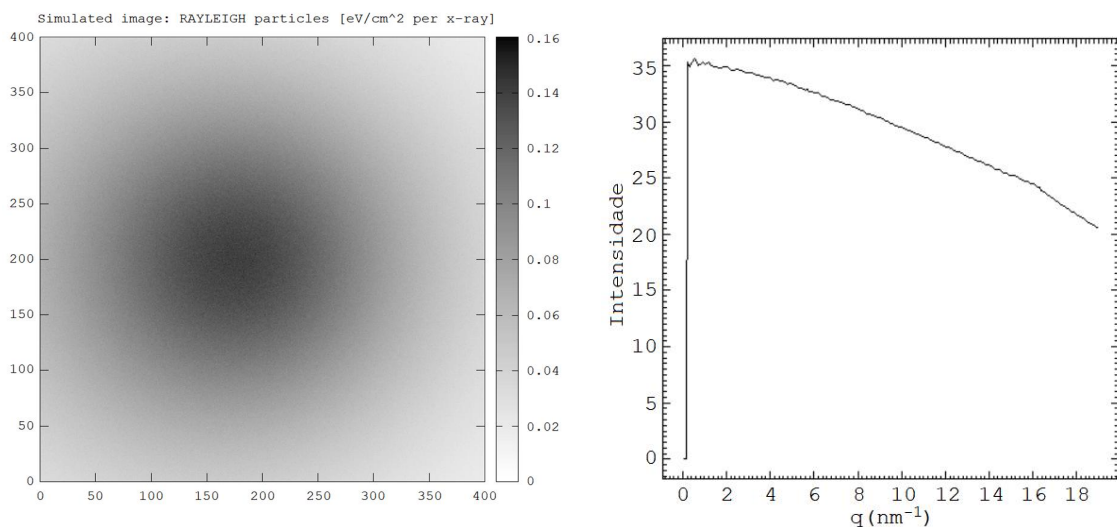


Figura 44 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 7.

Fonte: Autoria própria.

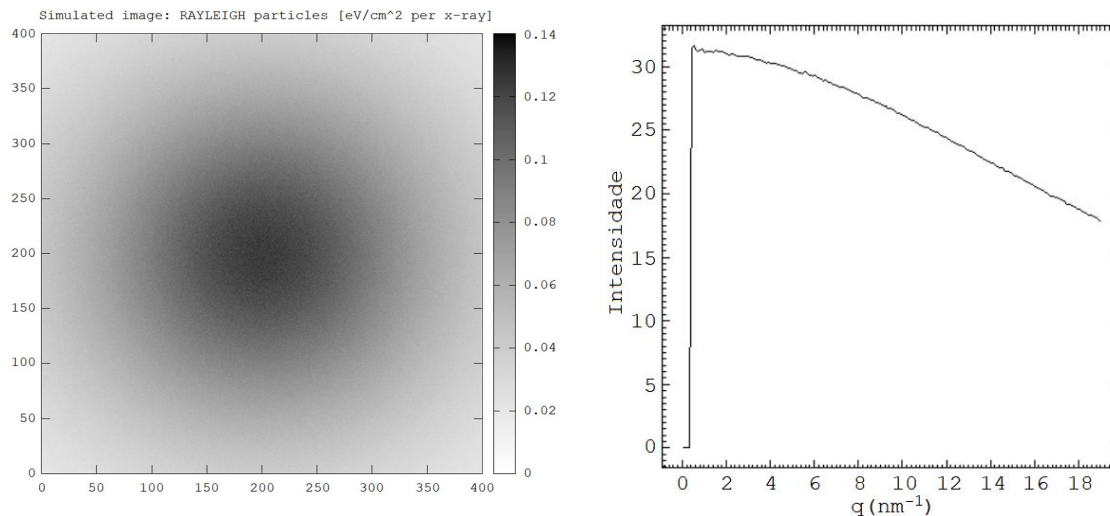


Figura 45 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 7.

Fonte: Autoria própria.

5.2.8 Comparação

No Gráfico 1, apresenta-se um gráfico comparativo de cada um dos materiais analisados com IAA, em *phantom* 1. É interessante ressaltar que os perfis de espalhamento do material PMMA, nas combinações em questão, foram semelhantes entre si.

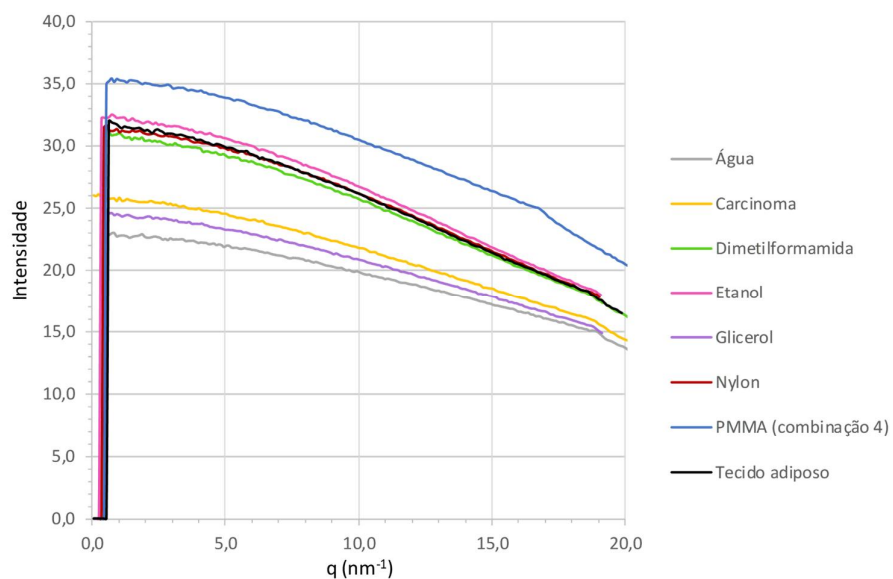


Gráfico 1 – Comparação dos materiais analisados com IAA, em *phantom* 1.

Fonte: Autoria própria.

5.3 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS

As Combinações de 8 a 11 possuem um cilindro externo de PMMA com dois cilindros menores internos de materiais distintos entre si, conforme a Figura 23 (*phantom 2*), mostrada anteriormente, e foram feitas com IAA.

5.3.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 8)

Os materiais internos da Combinação 8 são tecido adiposo e carcinoma. Na Figura 46, encontra-se o resultado para tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 47, o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 48, o resultado para carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm).

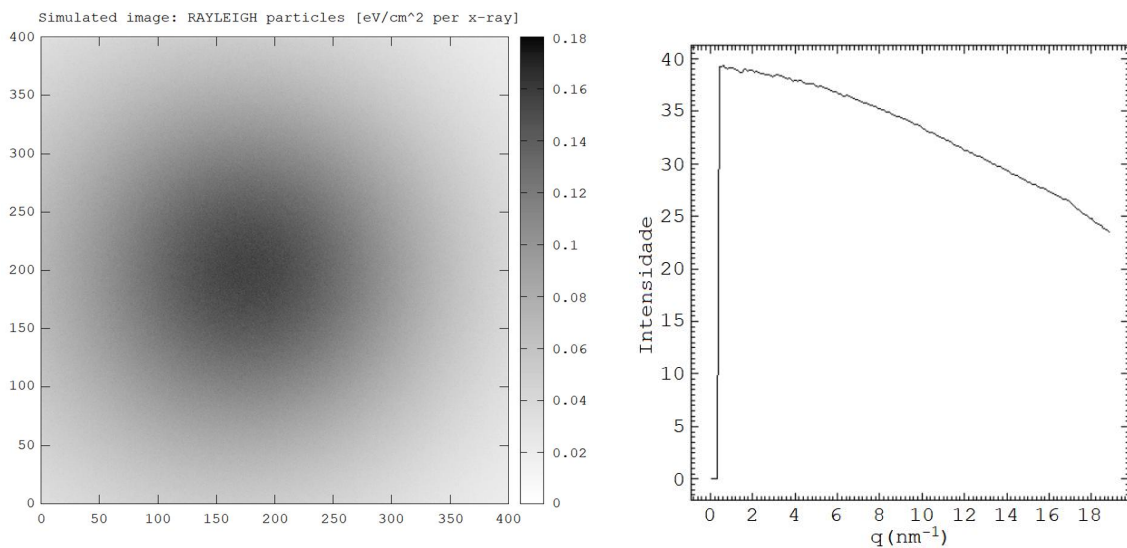


Figura 46 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 8.

Fonte: Autoria própria.

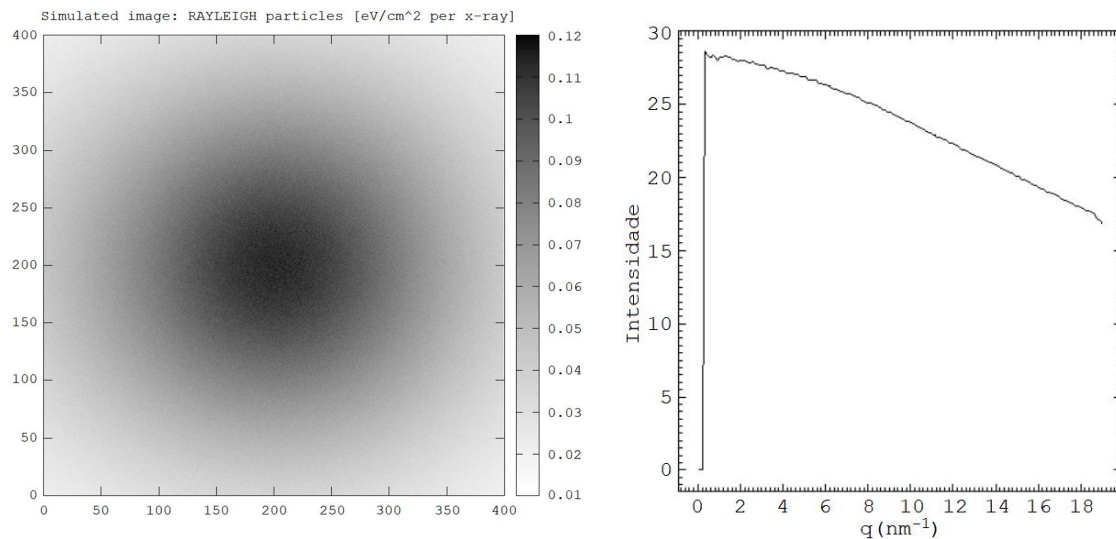


Figura 47 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 8.

Fonte: Autoria própria.

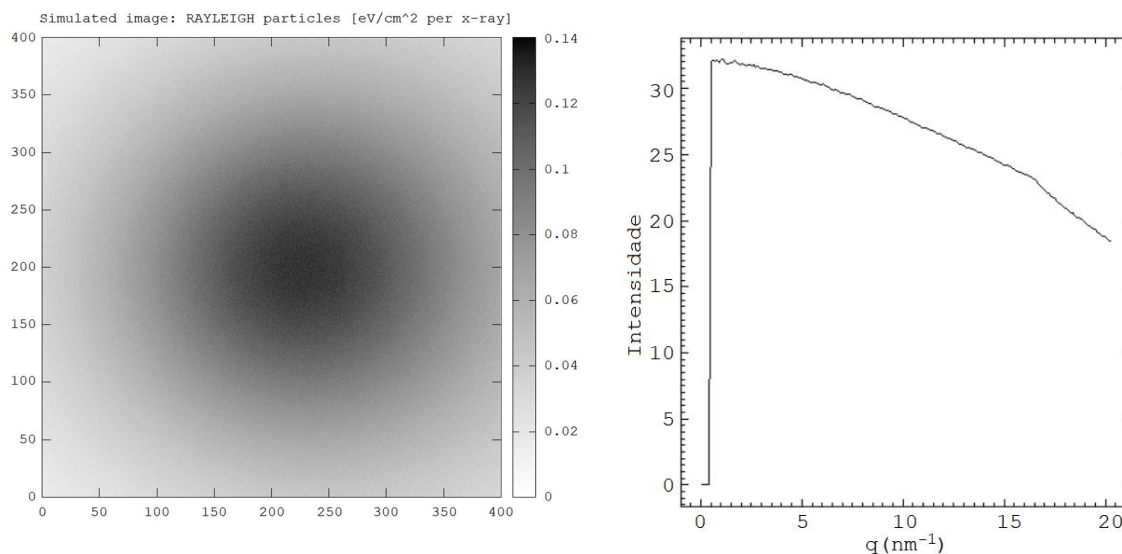


Figura 48 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 8.

Fonte: Autoria própria.

5.3.2 Água e nylon (Combinação 9)

Os materiais internos da Combinação 9 são água e nylon. Na Figura 49, encontra-se o resultado para água (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 50, o resultado

para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 51, o resultado para nylon (fonte em $y = 0,3$ mm).

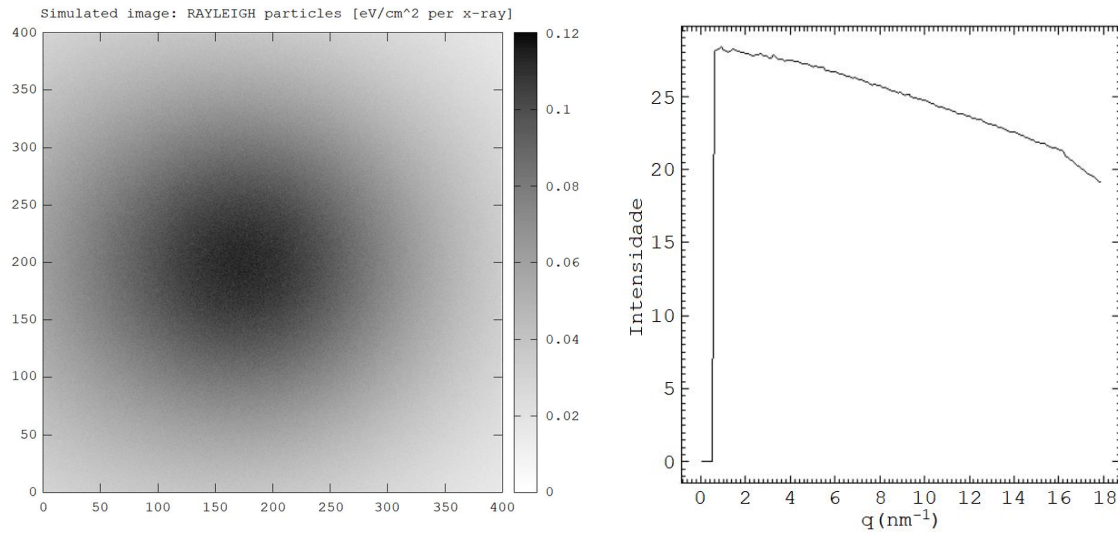


Figura 49 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 9.

Fonte: Autoria própria.

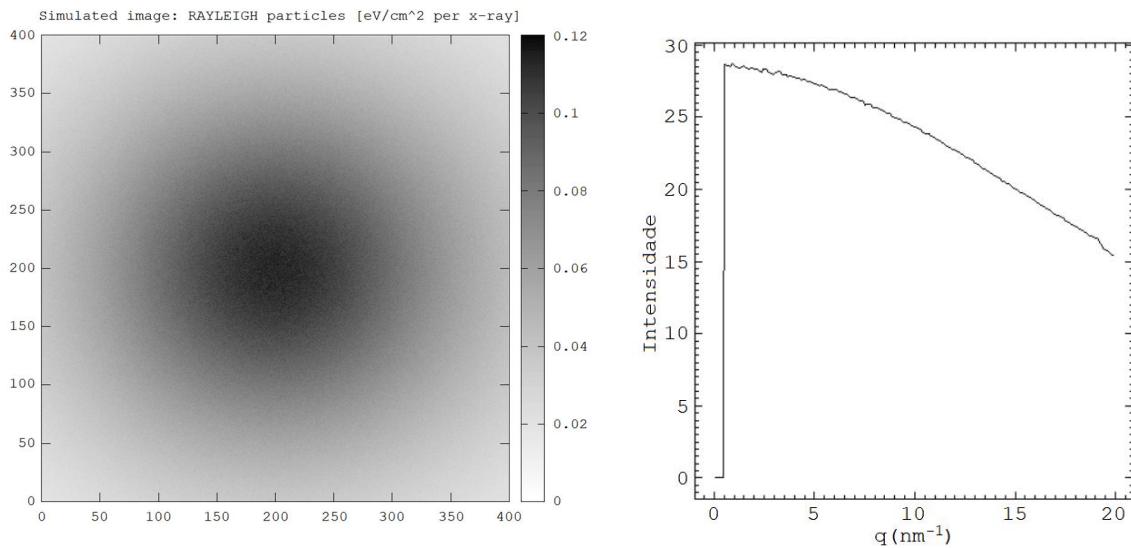


Figura 50 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 9.

Fonte: Autoria própria.

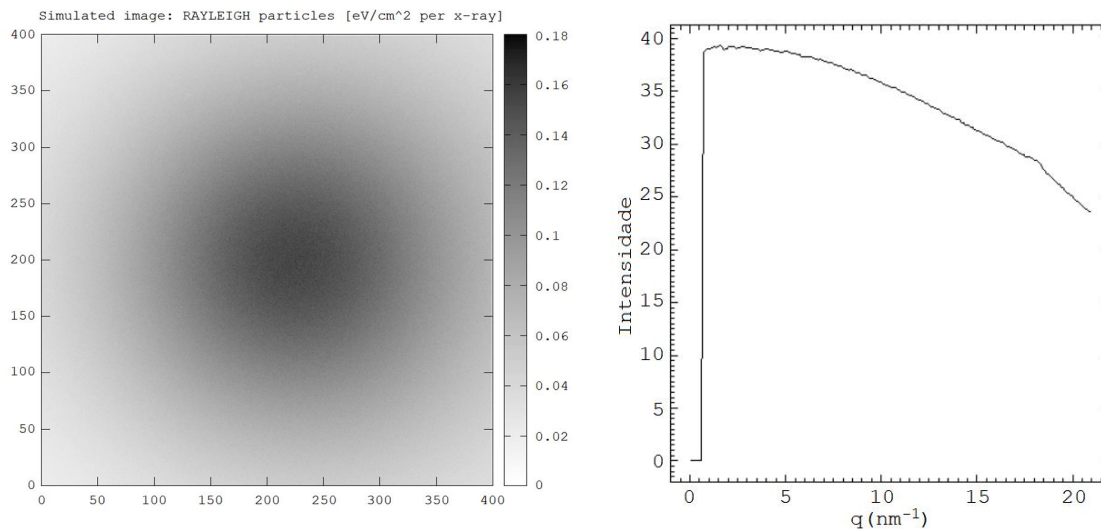


Figura 51 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 9.

Fonte: Autoria própria.

5.3.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 10)

Os materiais internos da Combinação 10 são dimetilformamida e glicerol. Na Figura 52, encontra-se o resultado para dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 53, o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 54, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm).

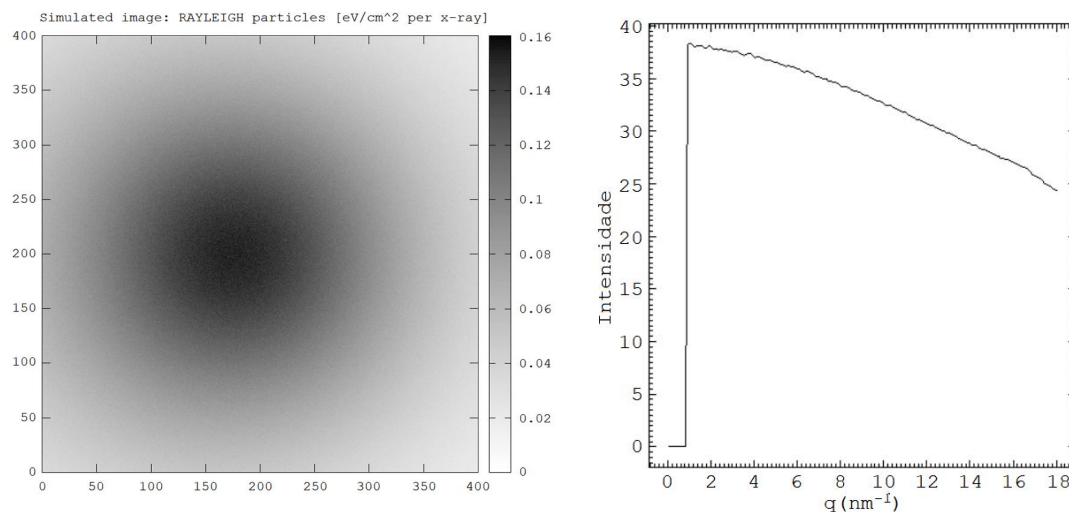


Figura 52 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 10.

Fonte: Autoria própria.

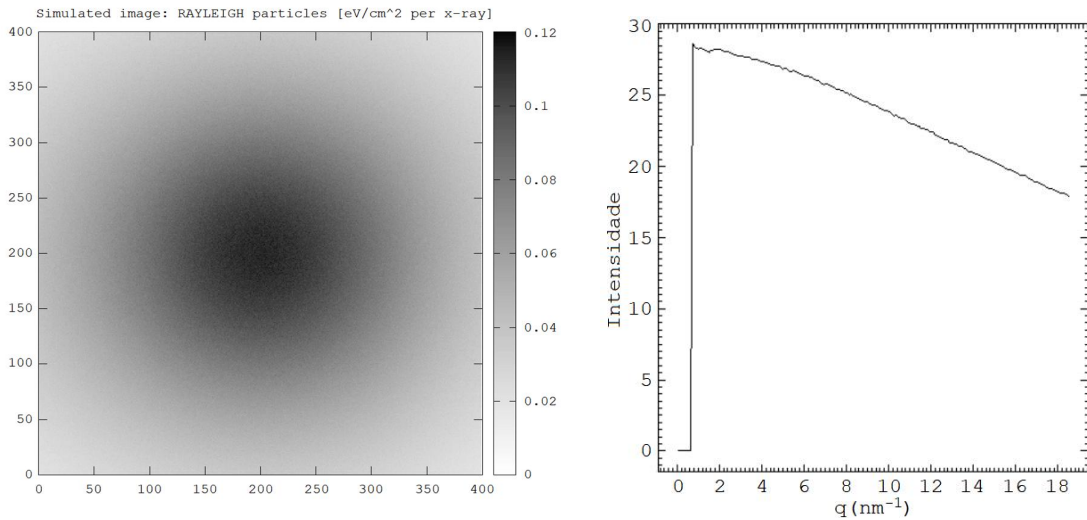


Figura 53 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 10.

Fonte: Autoria própria.

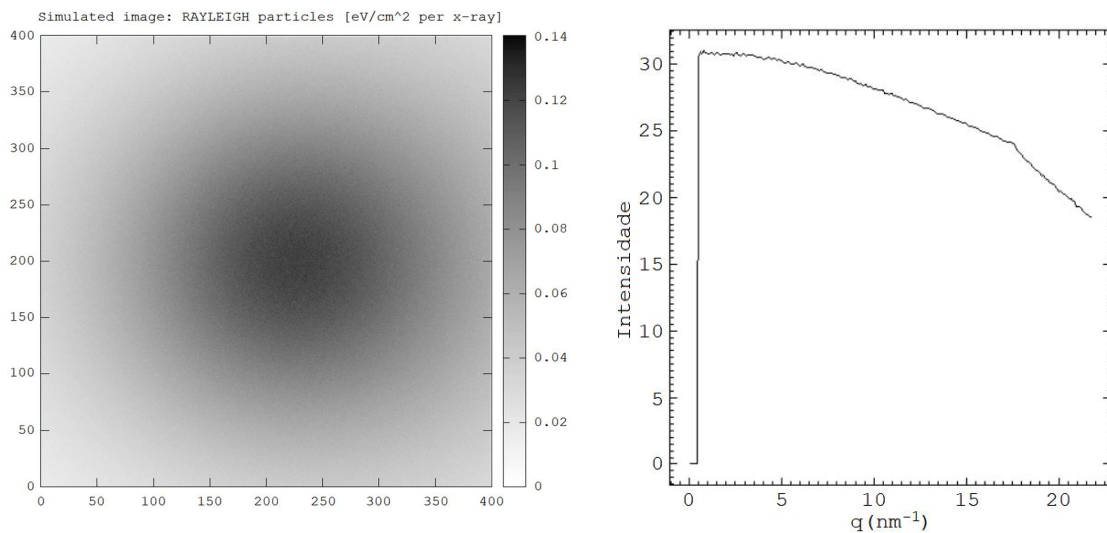


Figura 54 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 10.

Fonte: Autoria própria.

5.3.4 Etanol e glicerol (Combinação 11)

Os materiais internos da Combinação 11 são etanol e glicerol. Na Figura 55, encontra-se o resultado para etanol (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 56,

o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 57, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm).

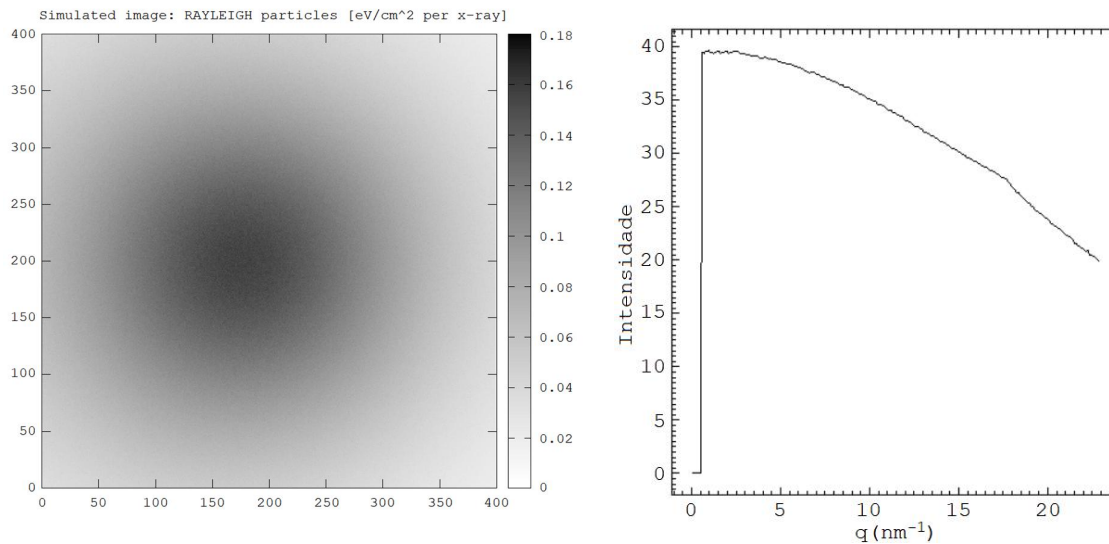


Figura 55 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 11.

Fonte: Autoria própria.

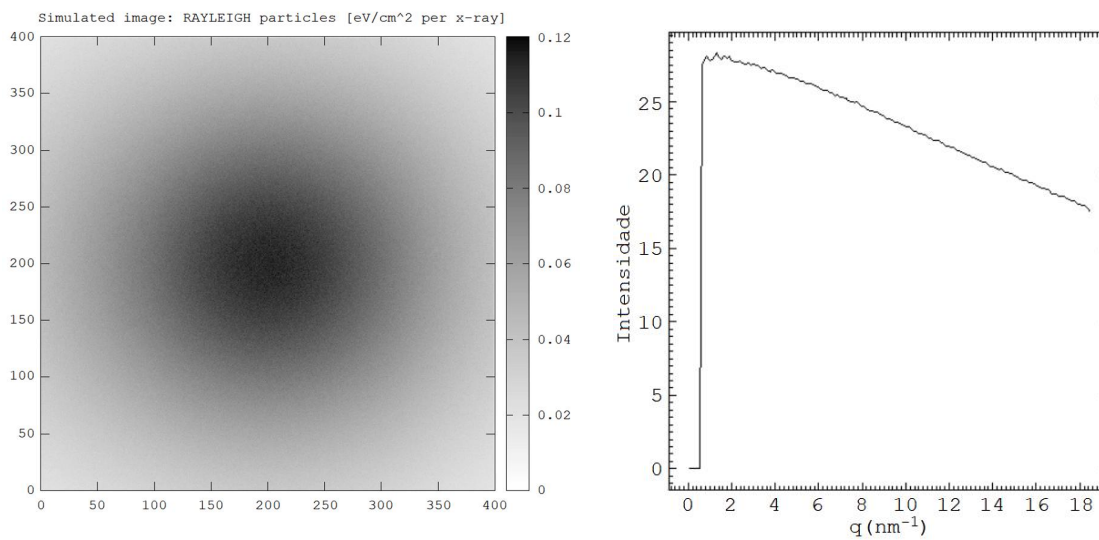


Figura 56 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 11.

Fonte: Autoria própria.

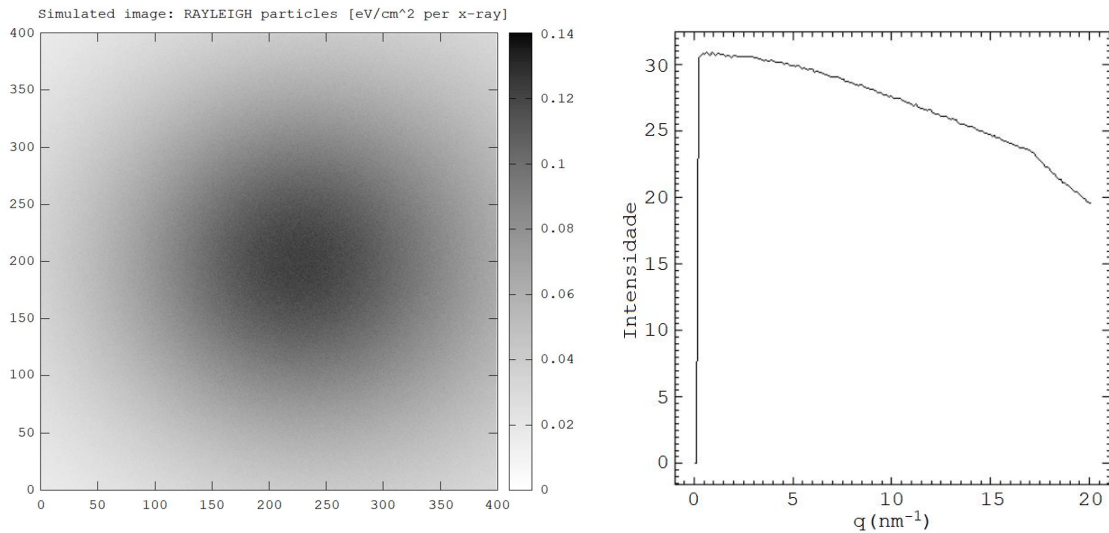


Figura 57 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 11.

Fonte: Autoria própria.

5.3.5 Comparação

No Gráfico 2, apresenta-se um gráfico comparativo de cada um dos materiais analisados com IAA, em *phantom 2*. É interessante ressaltar que os perfis de espalhamento do material PMMA, nas combinações em questão, foram semelhantes entre si (Gráfico 3). E também os perfis do material glicerol entre si (Gráfico 4).

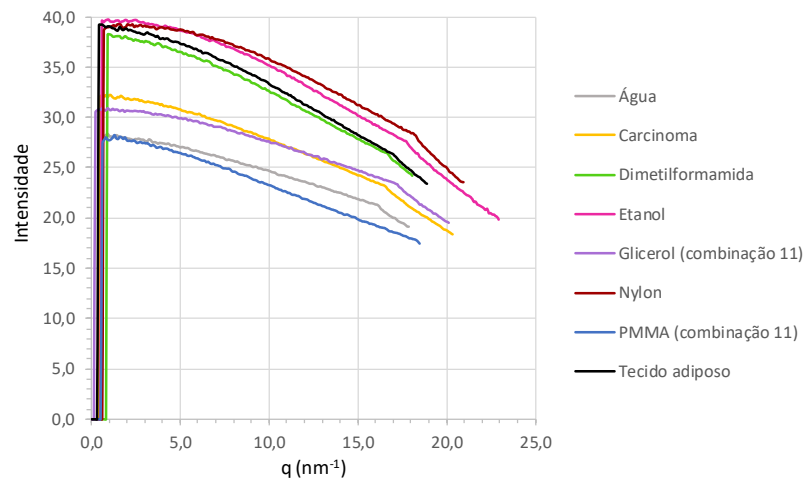


Gráfico 2 – Comparação dos materiais analisados com IAA, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

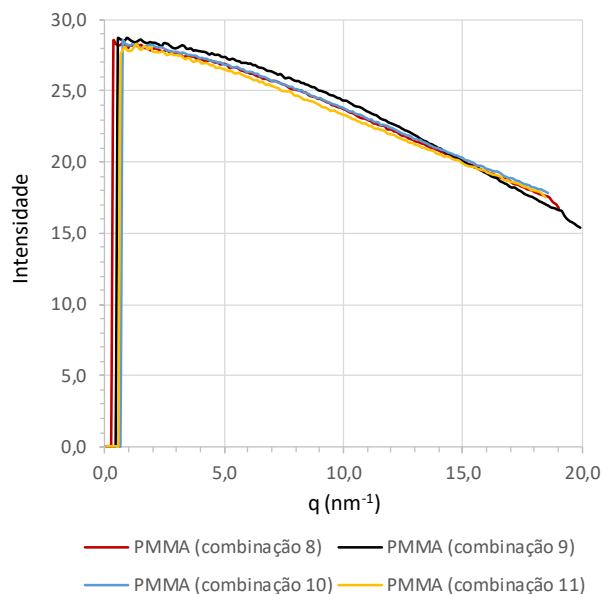


Gráfico 3 – Comparação do material PMMA nas diversas combinações em análise com IAA, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

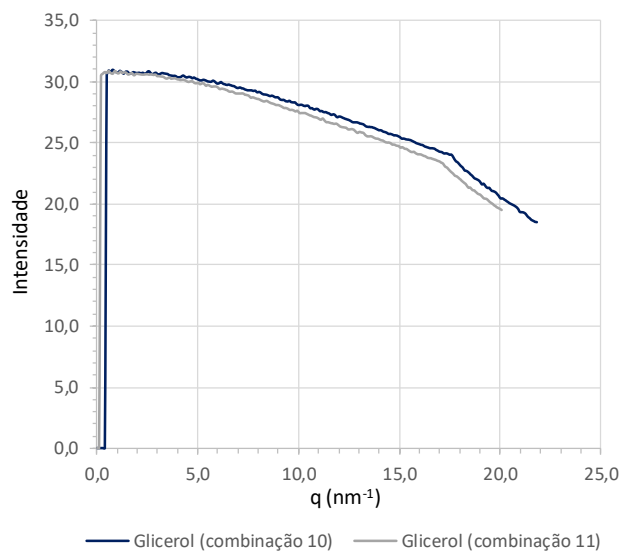


Gráfico 4 – Comparação do material glicerol nas diversas combinações em análise com IAA, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

5.4 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM UM CILINDRO MENOR INTERNO

As Combinações de 12 a 18 possuem um cilindro externo de PMMA com um cilindro menor interno de materiais diversos, conforme a Figura 22 (*phantom 1*), mostrada anteriormente, e foram feitas com MIF.

5.4.1 Tecido adiposo (Combinação 12)

O material interno da Combinação 12 é tecido adiposo. Na Figura 58, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 59, o resultado para tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm).

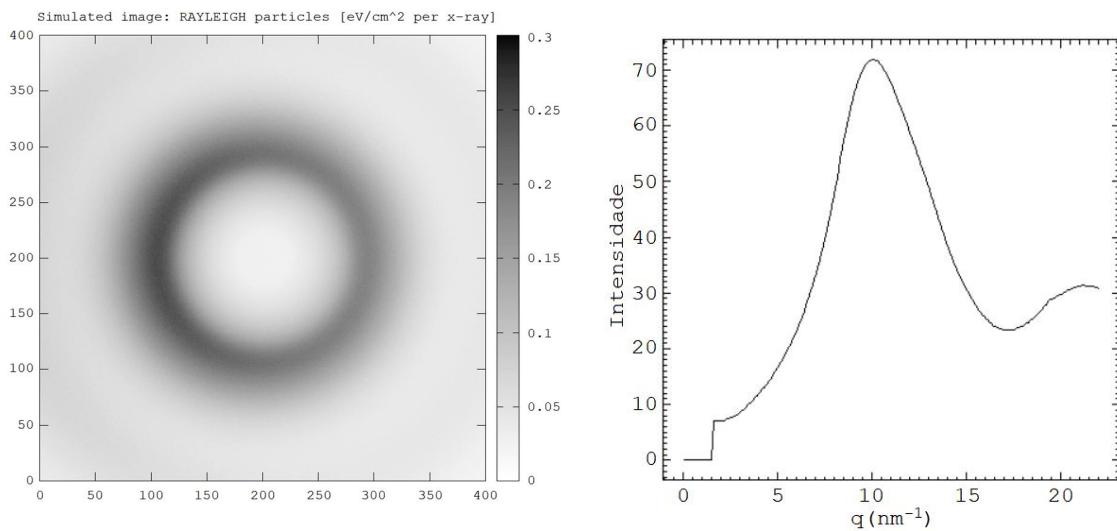


Figura 58 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 12.

Fonte: Autoria própria.

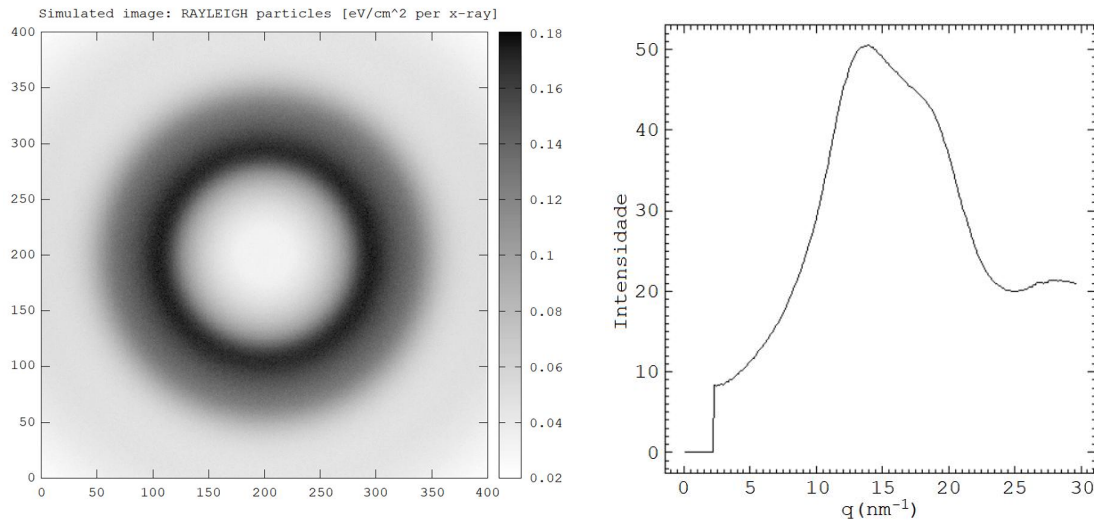


Figura 59 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 12.

Fonte: Autoria própria.

5.4.2 Água (Combinação 13)

O material interno da Combinação 13 é água. Na Figura 60, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 61, o resultado para água (fonte em $y = 0,2$ mm).

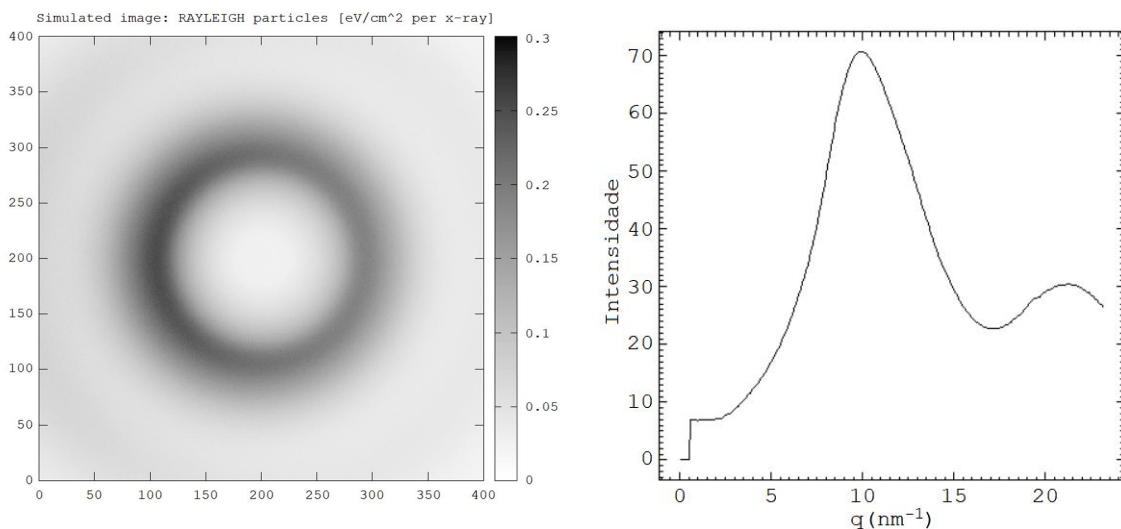


Figura 60 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 13.

Fonte: Autoria própria.

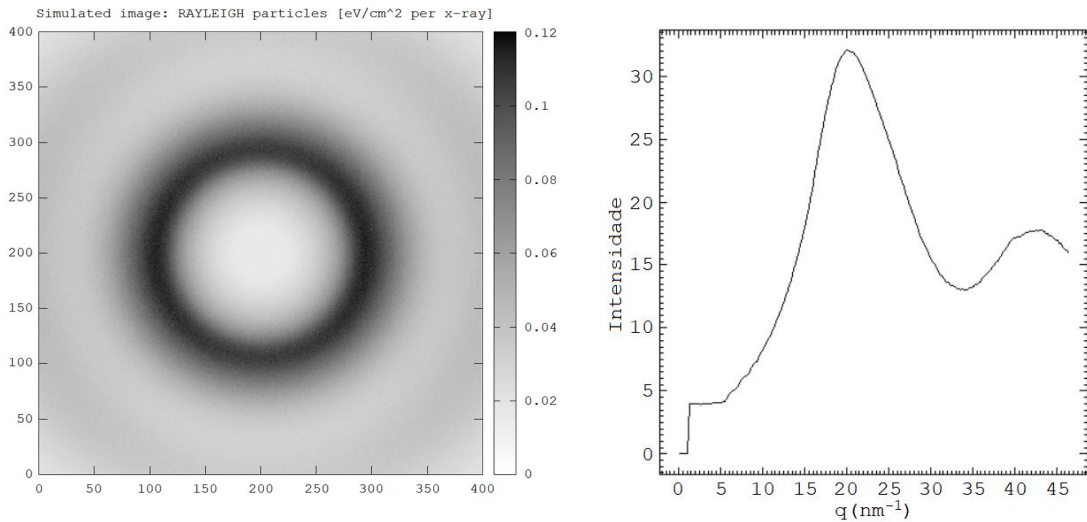


Figura 61 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 13.

Fonte: Autoria própria.

5.4.3 Carcinoma (Combinação 14)

O material interno da Combinação 14 é carcinoma. Na Figura 62, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 63, o resultado para carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm).

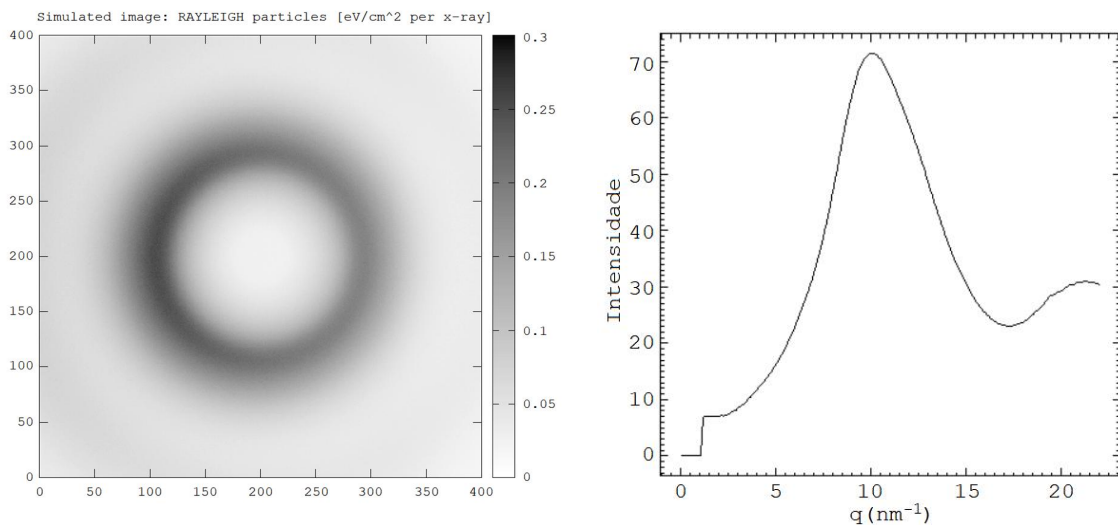


Figura 62 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 14.

Fonte: Autoria própria.

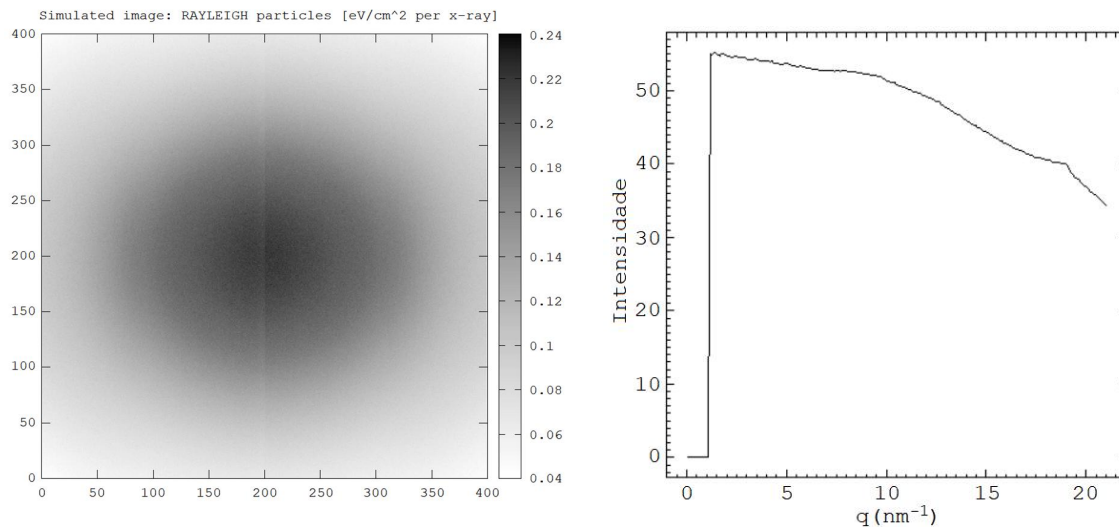


Figura 63 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 14.

Fonte: Autoria própria.

5.4.4 Dimetilformamida (Combinação 15)

O material interno da Combinação 15 é dimetilformamida. Na Figura 64, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 65, o resultado para dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm).

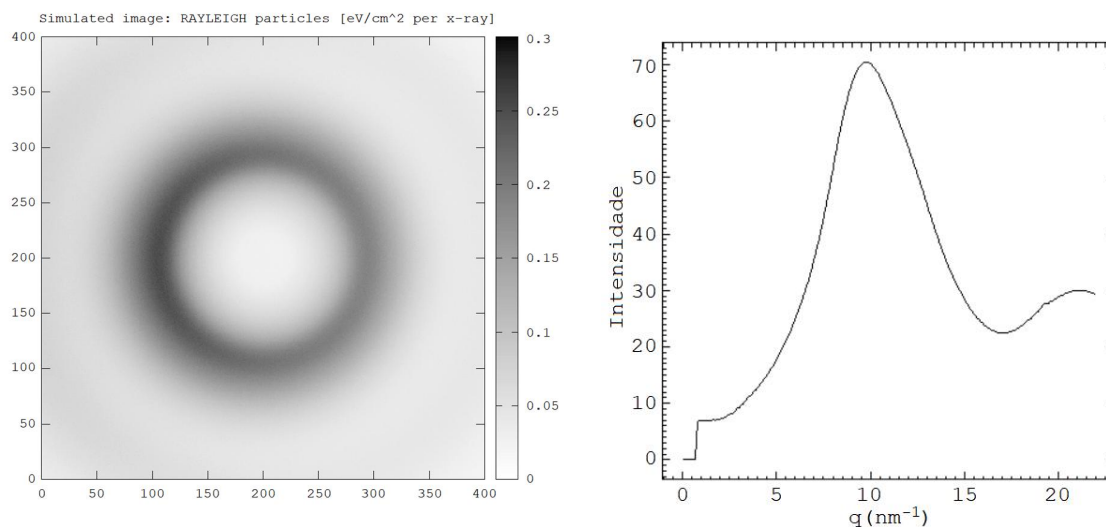


Figura 64 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 15.

Fonte: Autoria própria.

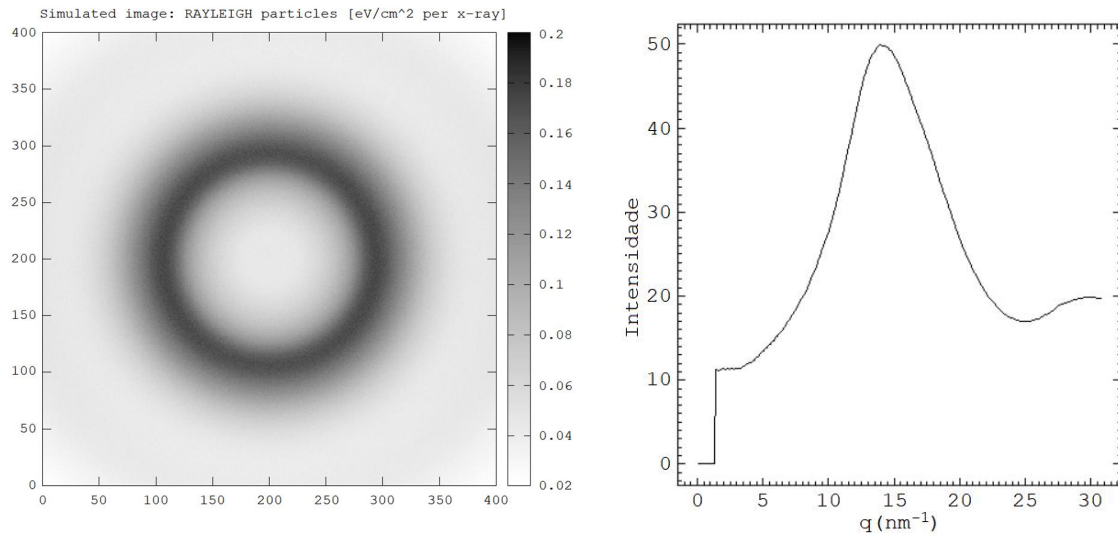


Figura 65 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 15.
Fonte: Autoria própria.

5.4.5 Etanol (Combinação 16)

O material interno da Combinação 16 é etanol. Na Figura 66, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 67, o resultado para etanol (fonte em $y = 0,2$ mm).

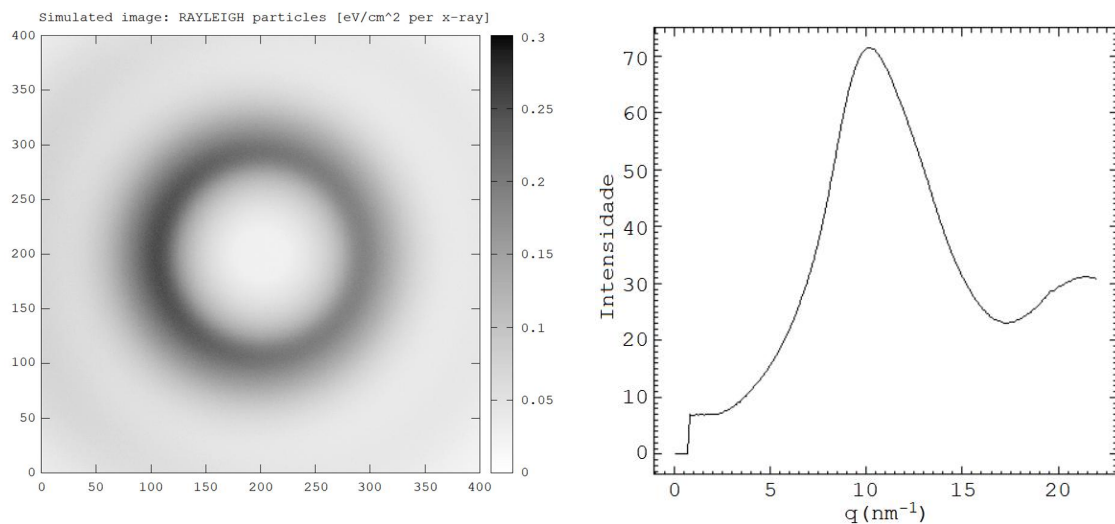


Figura 66 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 16.
Fonte: Autoria própria.

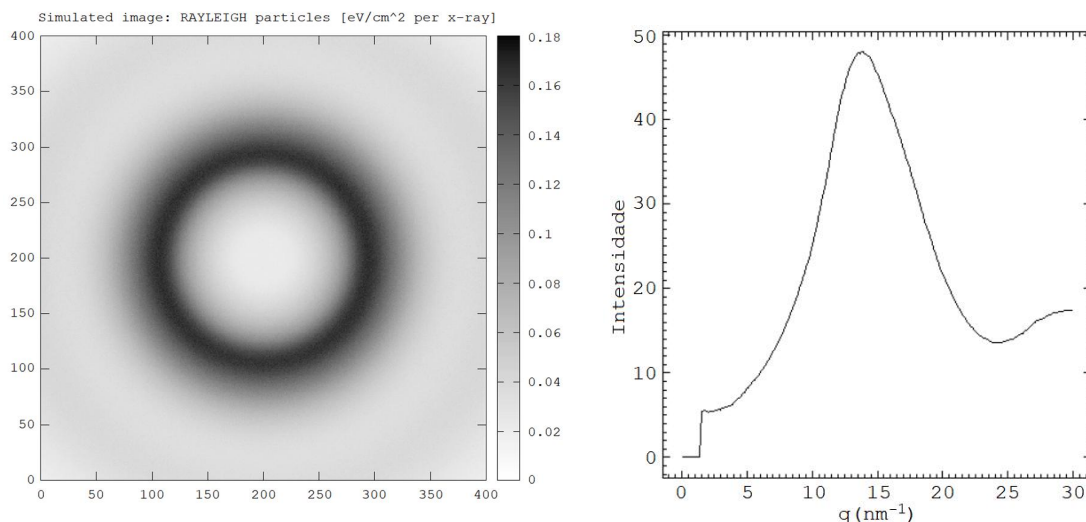


Figura 67 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 16.

Fonte: Autoria própria.

5.4.6 Glicerol (Combinação 17)

O material interno da Combinação 17 é glicerol. Na Figura 68, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 69, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm).

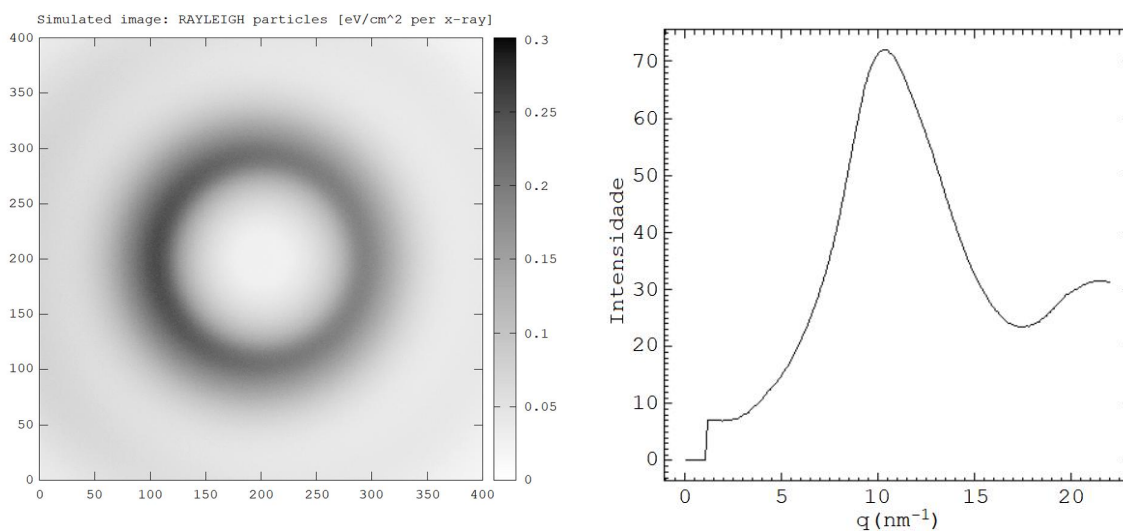


Figura 68 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 17.

Fonte: Autoria própria.

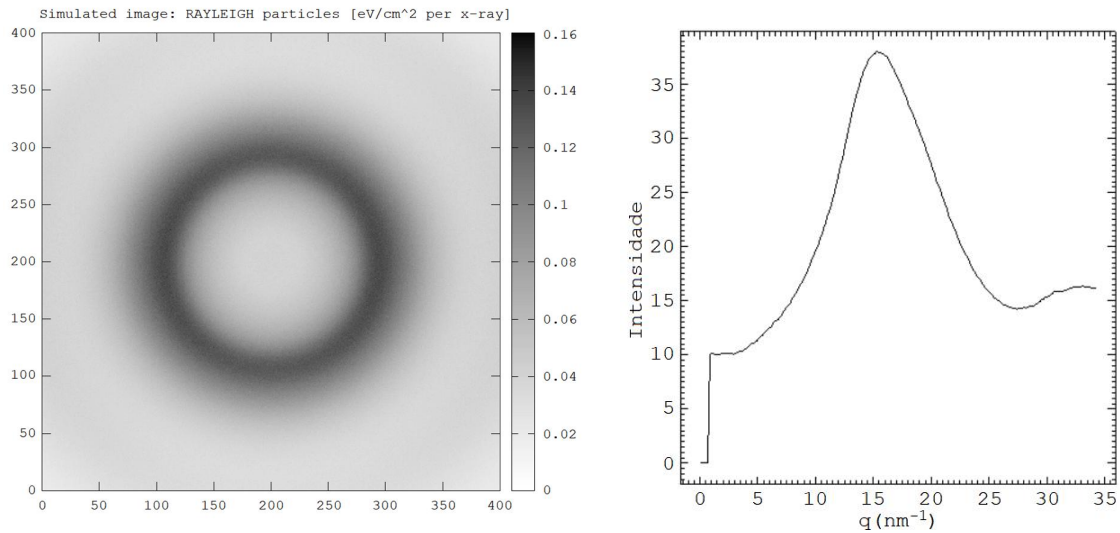


Figura 69 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 17.

Fonte: Autoria própria.

5.4.7 Nylon (Combinação 18)

O material interno da Combinação 18 é nylon. Na Figura 70, encontra-se o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm), resultado que foi semelhante para PMMA quando com a fonte em $y = 0,3$ mm. Na Figura 71, o resultado para nylon (fonte em $y = 0,2$ mm).

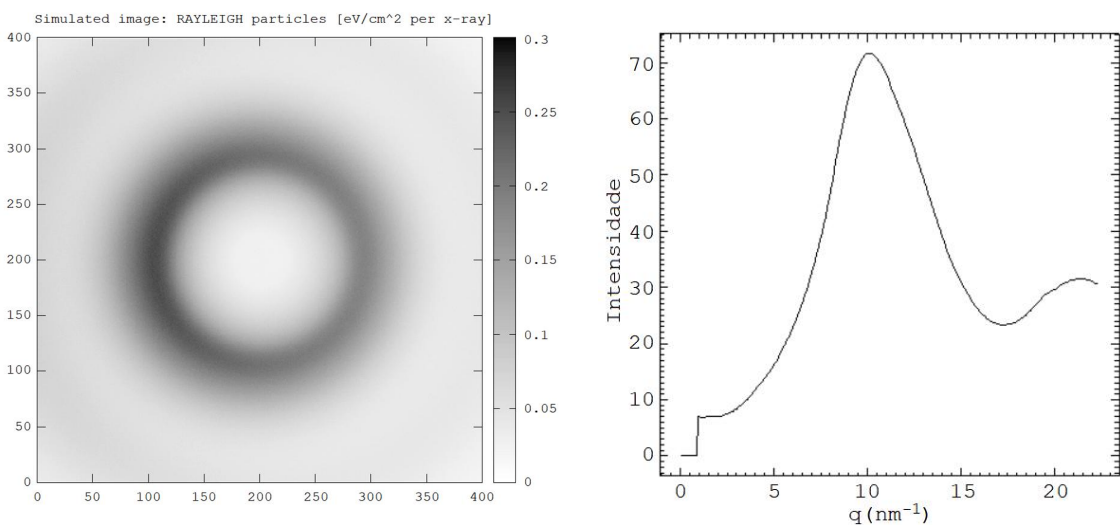


Figura 70 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 18.

Fonte: Autoria própria.

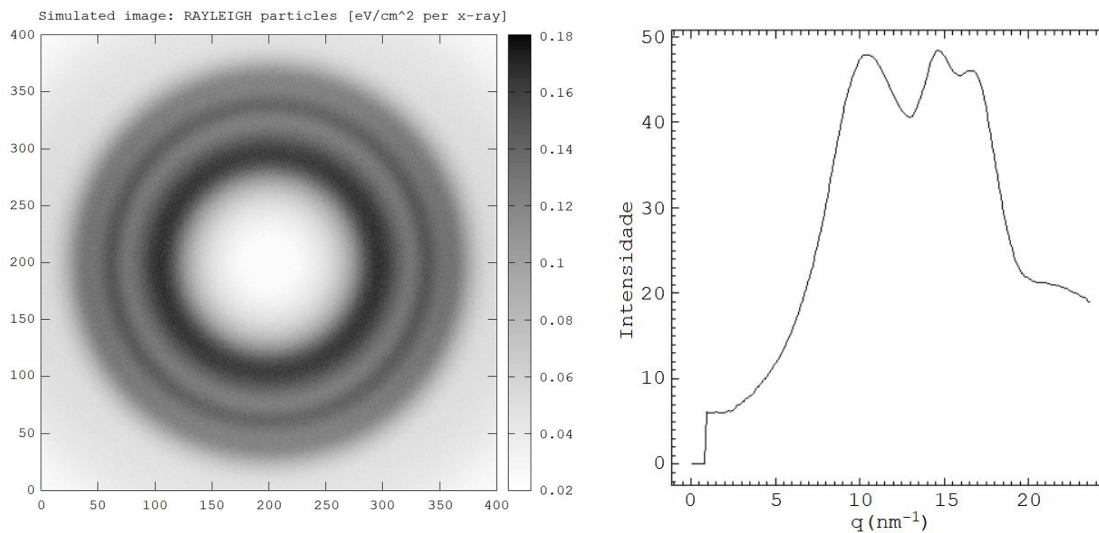


Figura 71 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 18.

Fonte: Autoria própria.

5.4.8 Comparação

No Gráfico 5, apresenta-se um gráfico comparativo de cada um dos materiais analisados com MIF, em *phantom 1*. É interessante ressaltar que os perfis de espalhamento do material PMMA, nas combinações em questão, foram semelhantes entre si.

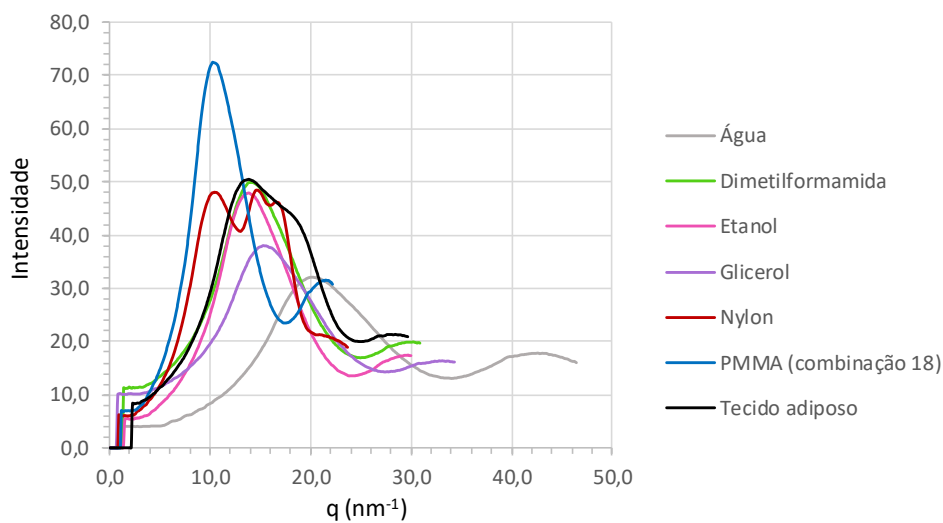


Gráfico 5 – Comparação dos materiais analisados com MIF, em *phantom 1*.

Fonte: Autoria própria.

5.5 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS

As Combinações de 19 a 22 possuem um cilindro externo de PMMA com dois cilindros menores internos de materiais distintos entre si, conforme a Figura 23 (*phantom 2*), mostrada anteriormente, e foram feitas com MIF.

5.5.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 19)

Os materiais internos da Combinação 19 são tecido adiposo e carcinoma. Na Figura 72, encontra-se o resultado para tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 73, o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 74, o resultado para carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm).

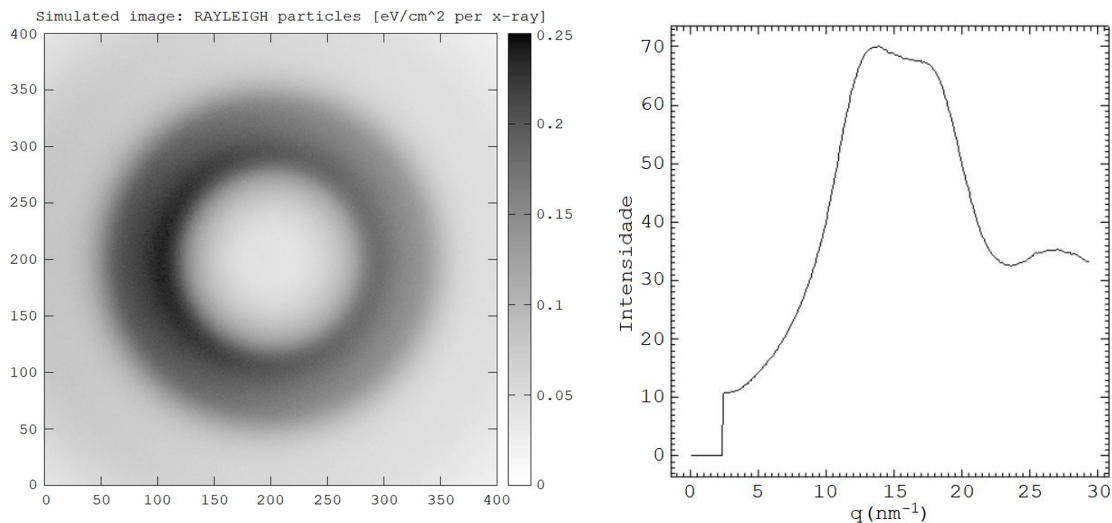


Figura 72 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de tecido adiposo (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 19.

Fonte: Autoria própria.

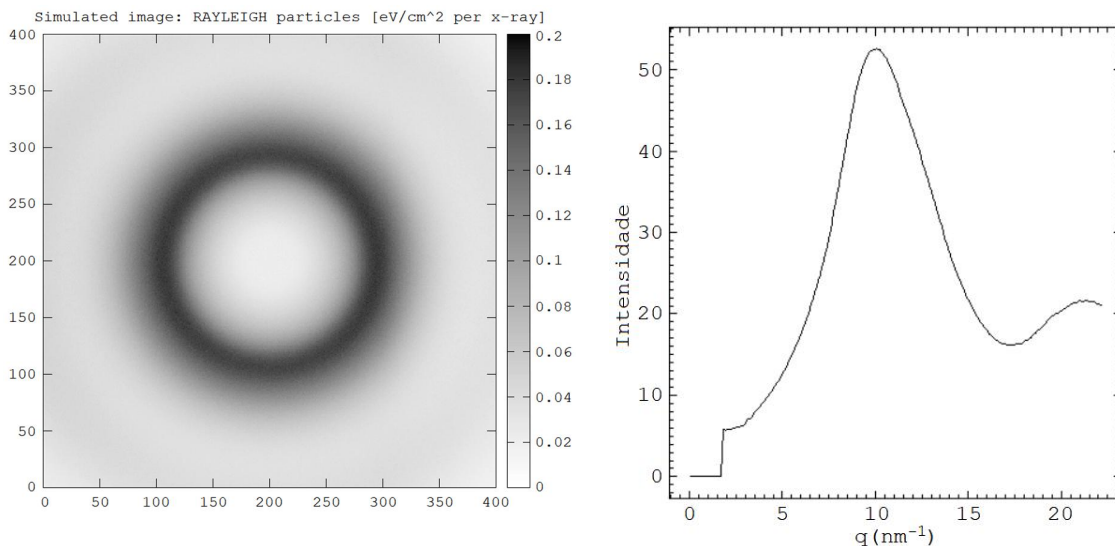


Figura 73 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 19.

Fonte: Autoria própria.

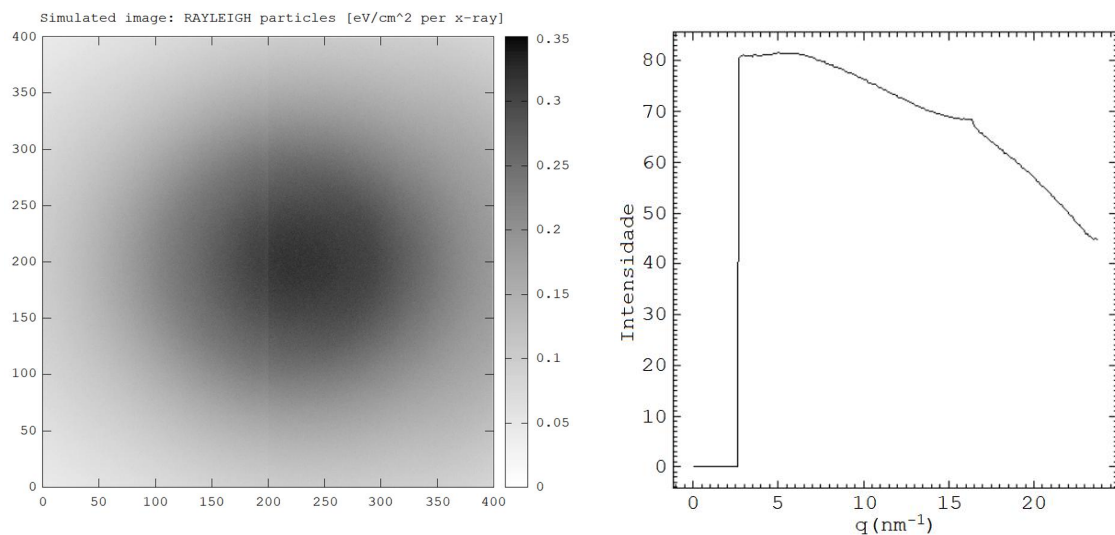


Figura 74 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de carcinoma (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 19.

Fonte: Autoria própria.

5.5.2 Água e nylon (Combinação 20)

Os materiais internos da Combinação 20 são água e nylon. Na Figura 75, encontra-se o resultado para água (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 76, o resultado

para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 77, o resultado para nylon (fonte em $y = 0,3$ mm).

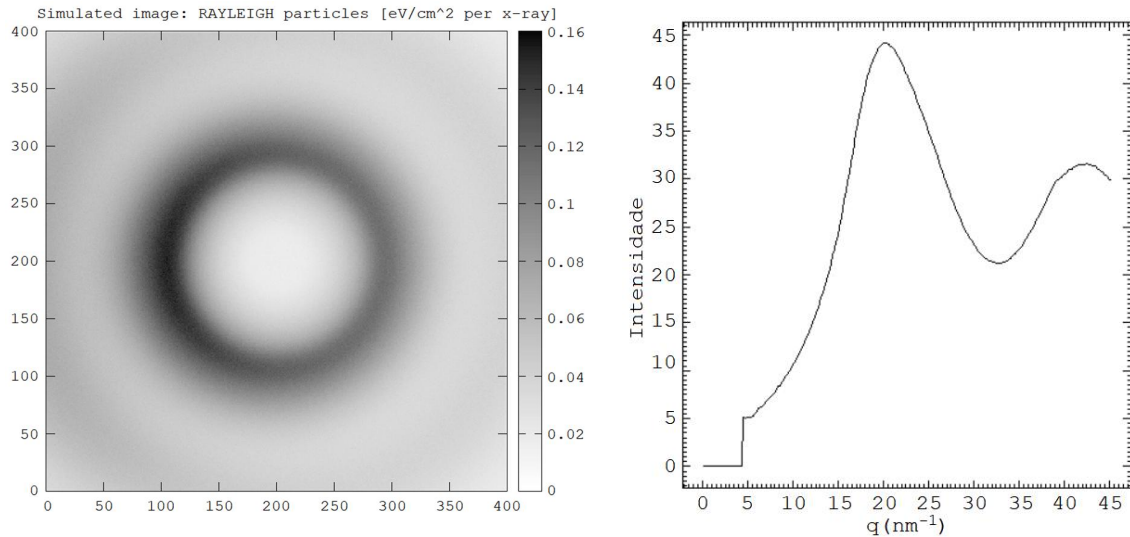


Figura 75 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de água (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 20.

Fonte: Autoria própria.

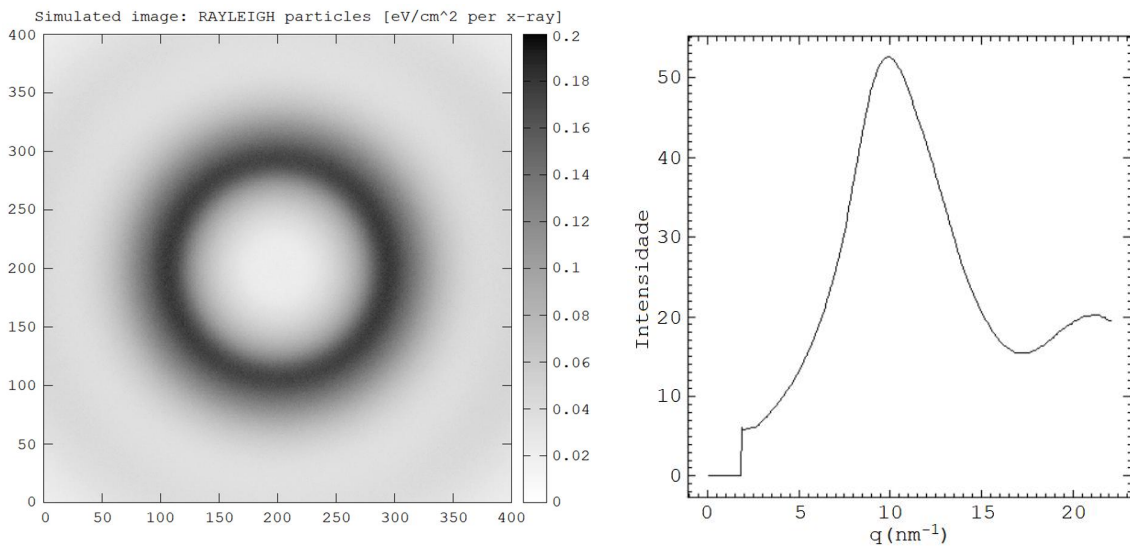


Figura 76 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 20.

Fonte: Autoria própria.

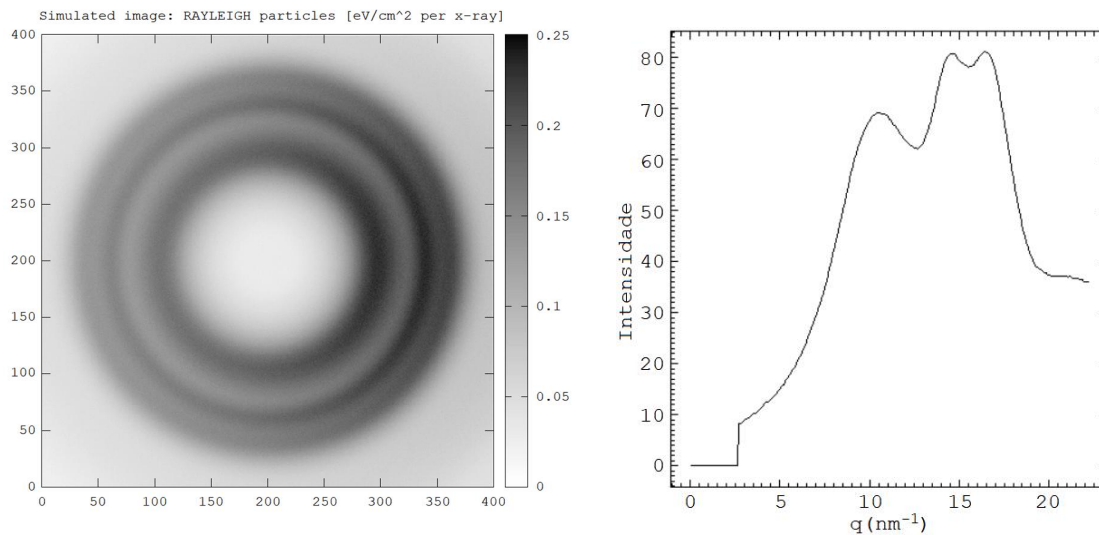


Figura 77 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de nylon (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 20.

Fonte: Autoria própria.

5.5.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 21)

Os materiais internos da Combinação 21 são dimetilformamida e glicerol. Na Figura 78, encontra-se o resultado para dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 79, o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 80, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm).

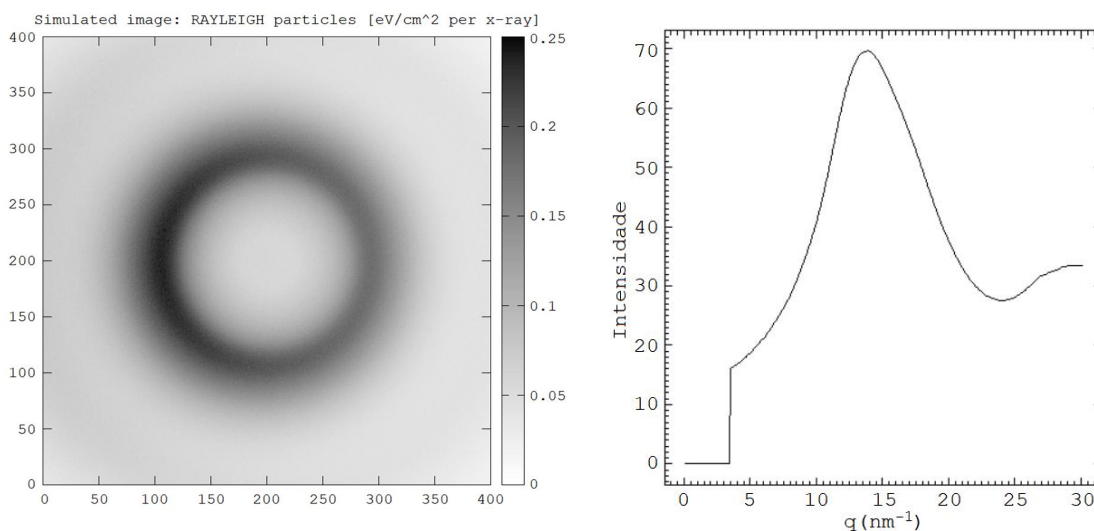


Figura 78 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de dimetilformamida (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 21.

Fonte: Autoria própria.

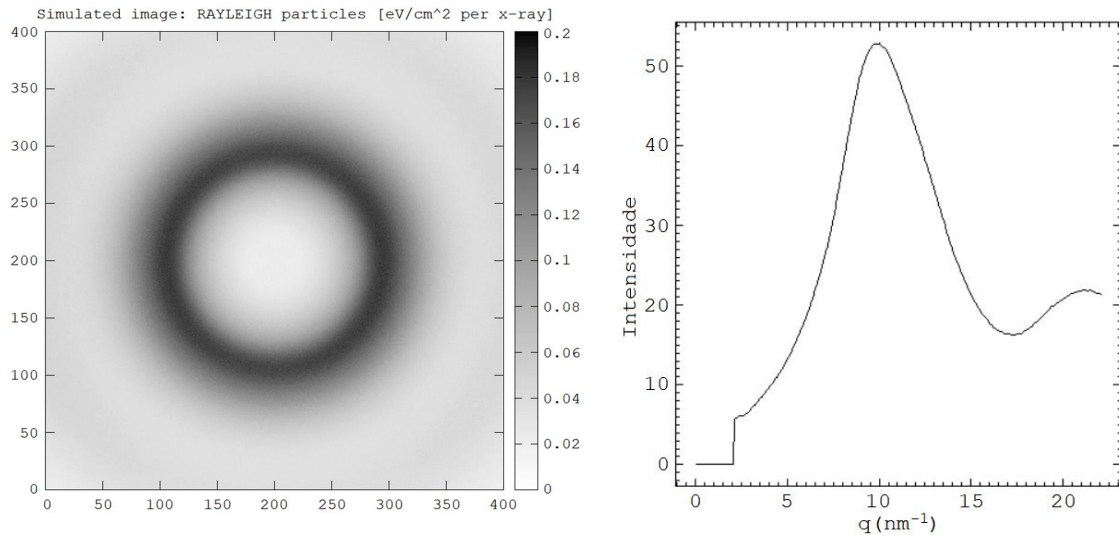


Figura 79 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 21.

Fonte: Autoria própria.

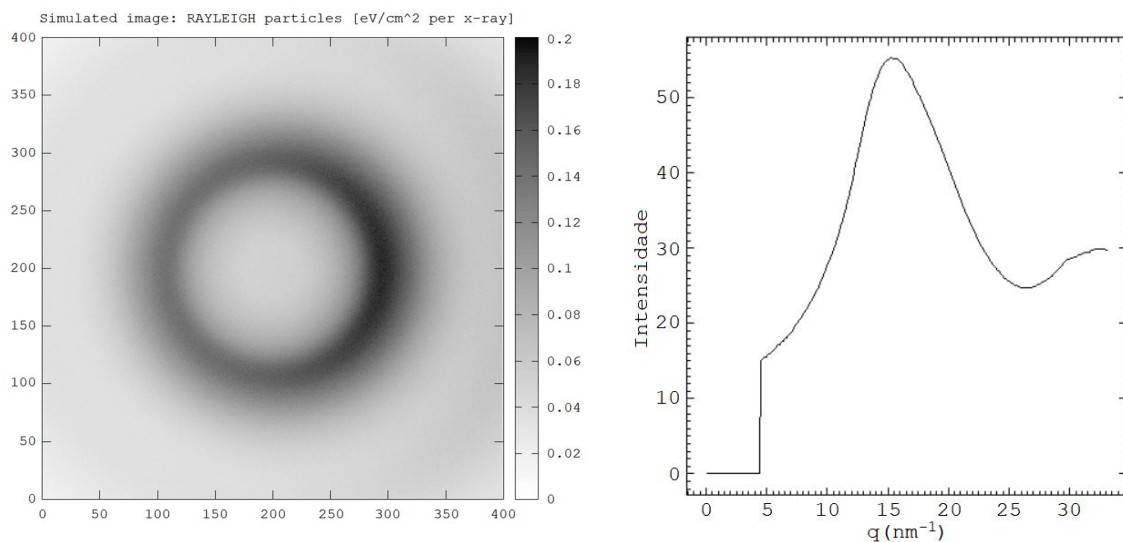


Figura 80 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 21.

Fonte: Autoria própria.

5.5.4 Etanol e glicerol (Combinação 22)

Os materiais internos da Combinação 22 são etanol e glicerol. Na Figura 81, encontra-se o resultado para etanol (fonte em $y = 0,1$ mm). Na Figura 82,

o resultado para PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm). E na Figura 83, o resultado para glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm).

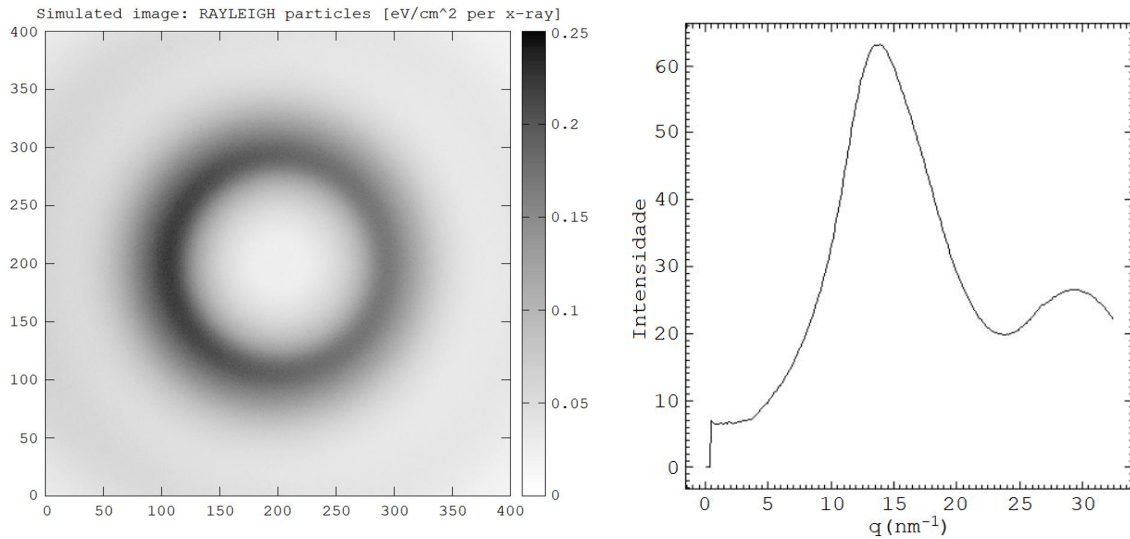


Figura 81 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de etanol (fonte em $y = 0,1$ mm) para a Combinação 22.

Fonte: Autoria própria.

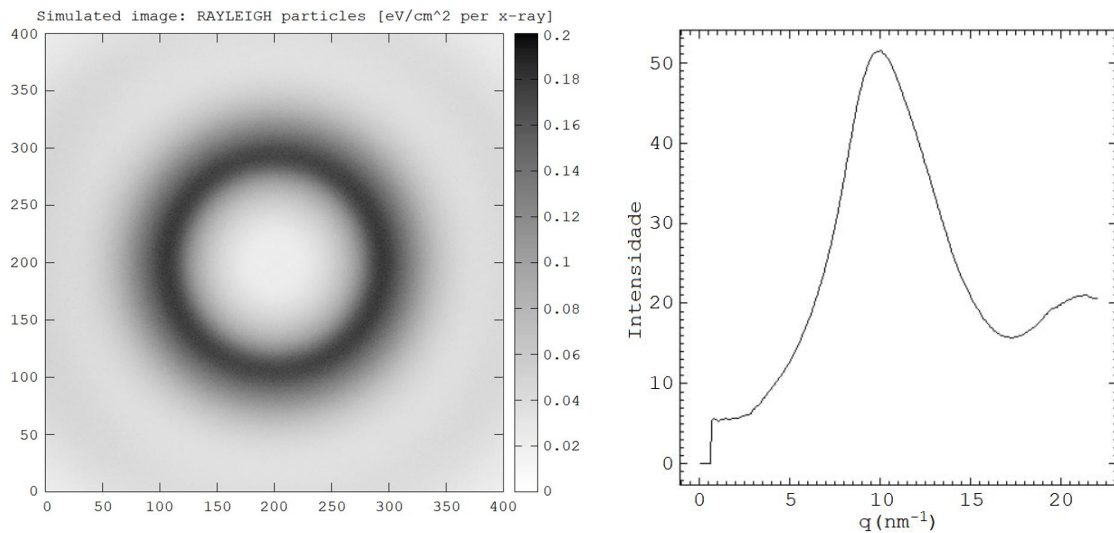


Figura 82 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de PMMA (fonte em $y = 0,2$ mm) para a Combinação 22.

Fonte: Autoria própria.

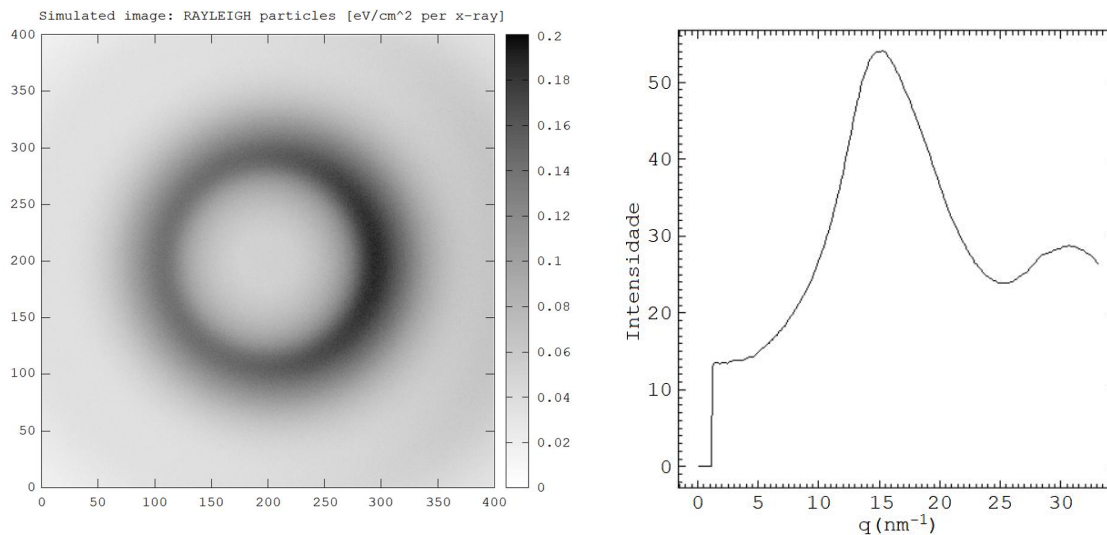


Figura 83 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) de glicerol (fonte em $y = 0,3$ mm) para a Combinação 22.

Fonte: Autoria própria.

5.5.5 Comparação

No Gráfico 6, apresenta-se um gráfico comparativo de cada um dos materiais analisados com MIF, em *phantom 2*. É interessante ressaltar que os perfis de espalhamento do material PMMA, nas combinações em questão, foram semelhantes entre si (Gráfico 7). E também os perfis do material glicerol entre si (Gráfico 8).

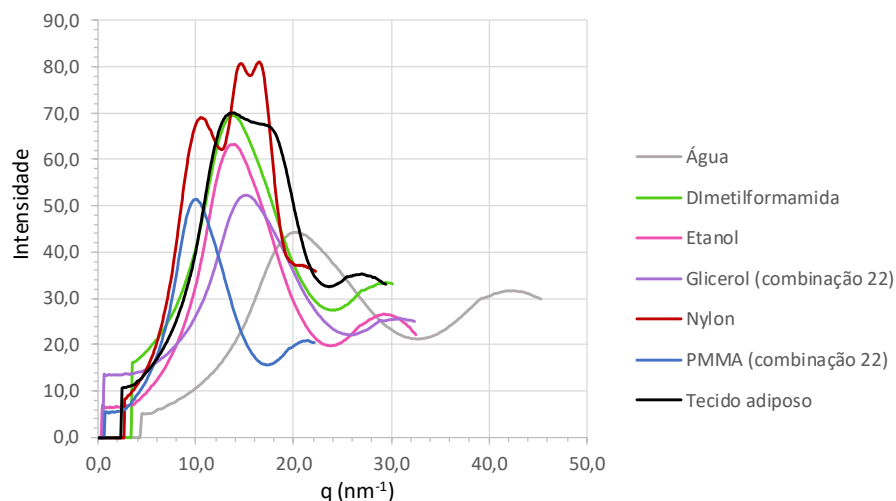


Gráfico 6 – Comparação dos materiais analisados com MIF, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

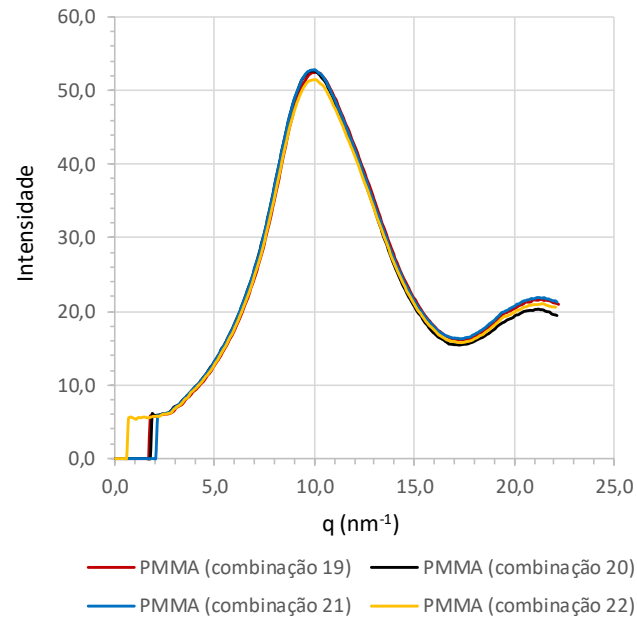


Gráfico 7 – Comparação do material PMMA nas diversas combinações em análise com MIF, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

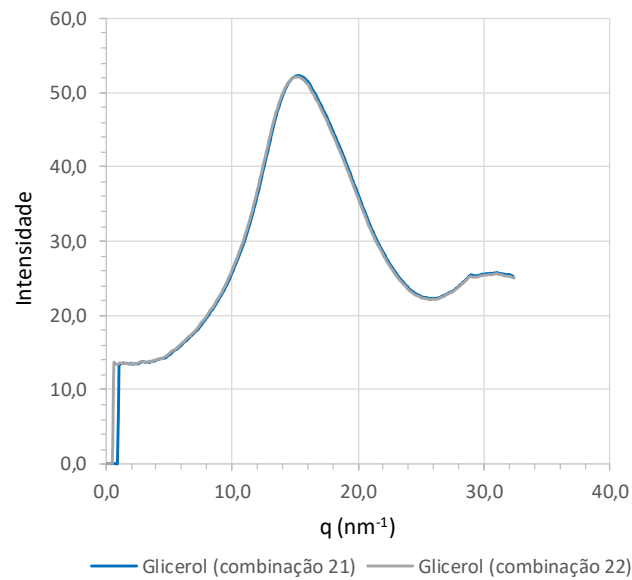


Gráfico 8 – Comparação do material glicerol nas diversas combinações em análise com MIF, em *phantom 2*.

Fonte: Autoria própria.

5.6 SIMULAÇÕES COM IAA PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS, COM FONTE GIRADA EM 90°

A Combinação 23 possui um cilindro externo de PMMA com dois cilindros menores internos de materiais distintos entre si, conforme a Figura 24 (*phantom 2*), mostrada anteriormente, com a fonte girada em 90°, e foram feitas com IAA.

5.6.1 Água e nylon (Combinação 23)

Os materiais internos da Combinação 23 são água e nylon. Na Figura 84, encontra-se o resultado obtido com a fonte de fótons direcionada para cima. E na Figura 85, o resultado obtido com a fonte direcionada para baixo.

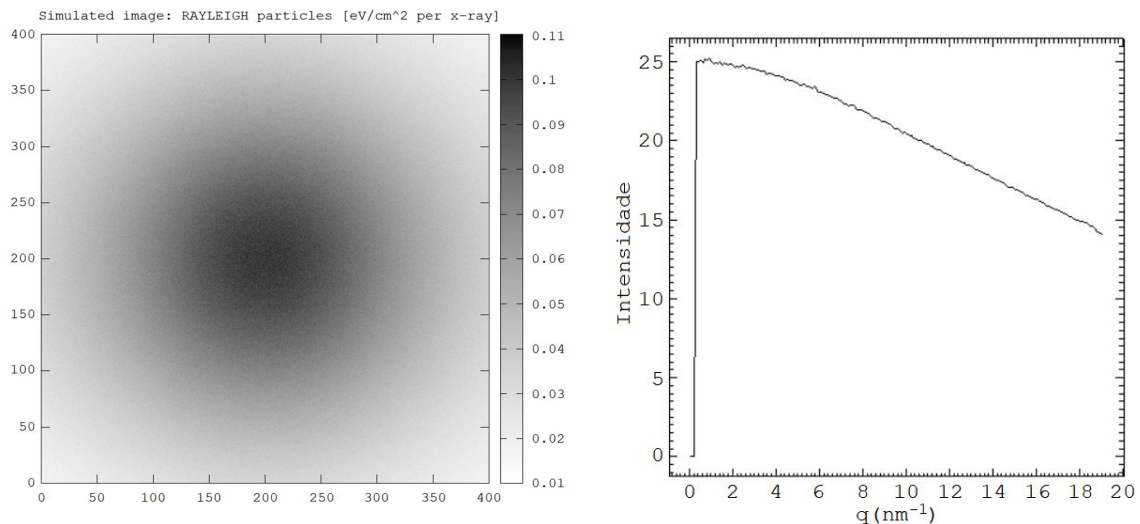


Figura 84 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 23, com a fonte de fótons direcionada para cima.

Fonte: Autoria própria.

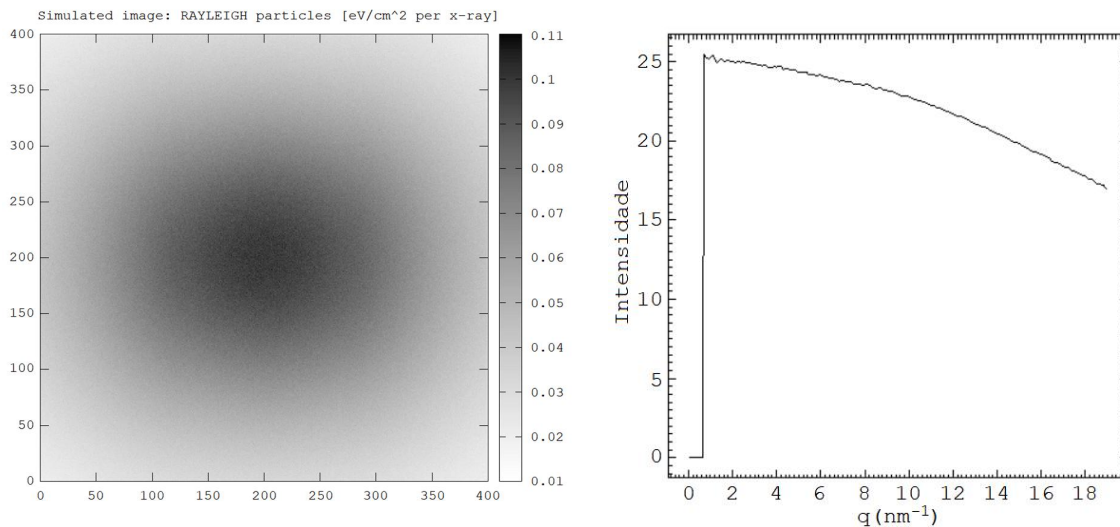


Figura 85 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 23, com a fonte de fótons direcionada para baixo.
Fonte: Autoria própria.

5.6.2 Comparação

A seguir, apresenta-se o gráfico da combinação em questão, relacionando o perfil de espalhamento com a fonte de fótons direcionada para cima e comparando-o com o perfil de espalhamento com a fonte direcionada para baixo (Gráfico 9), percebendo-se que foram semelhantes entre si.

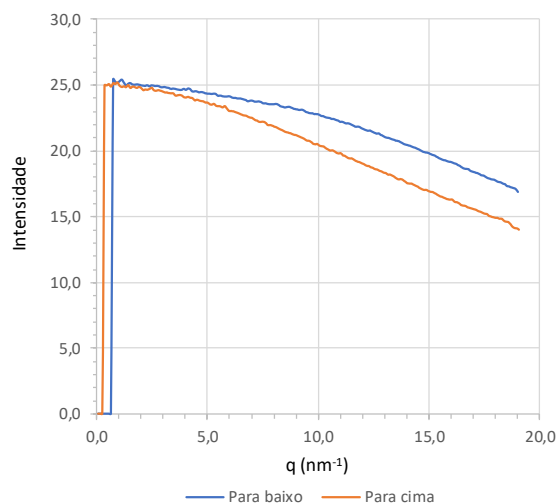


Gráfico 9 – Comparação das simulações na Combinação 23, modificando-se o sentido da fonte.

Fonte: Autoria própria.

5.7 SIMULAÇÕES COM MIF PARA CILINDRO DE PMMA COM DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS, COM FONTE GIRADA EM 90°

As Combinações de 24 a 27 possuem um cilindro externo de PMMA com dois cilindros menores internos de materiais distintos entre si, conforme a Figura 24 (*phantom 2*), mostrada anteriormente, com a fonte girada em 90°, e foram feitas com MIF.

5.7.1 Tecido adiposo e carcinoma (Combinação 24)

Os materiais internos da Combinação 24 são tecido adiposo e carcinoma. Na Figura 86, encontra-se o resultado obtido com a fonte de fótons direcionada para cima. E na Figura 87, o resultado obtido com a fonte direcionada para baixo.

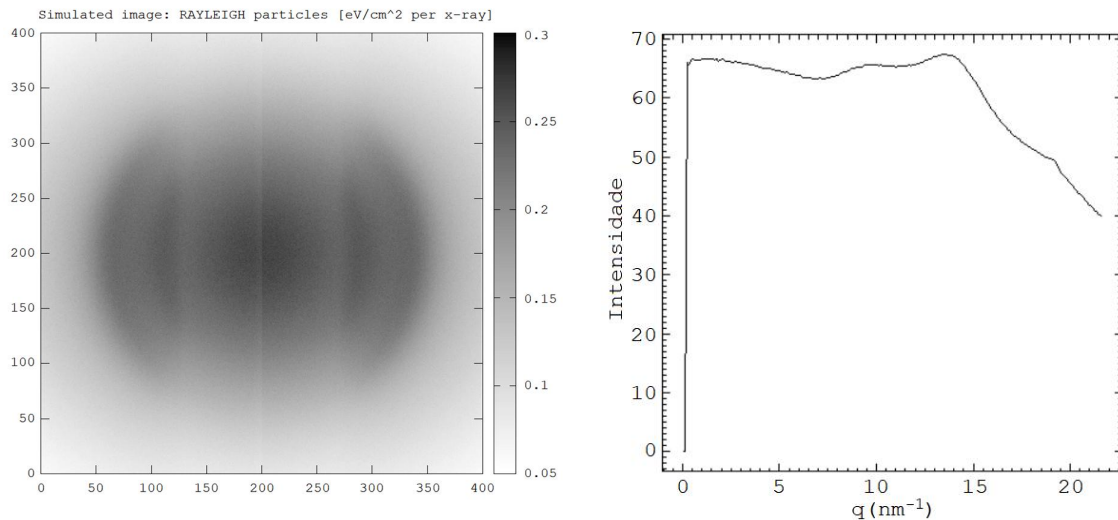


Figura 86 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 24, com a fonte de fótons direcionada para cima.

Fonte: Autoria própria.

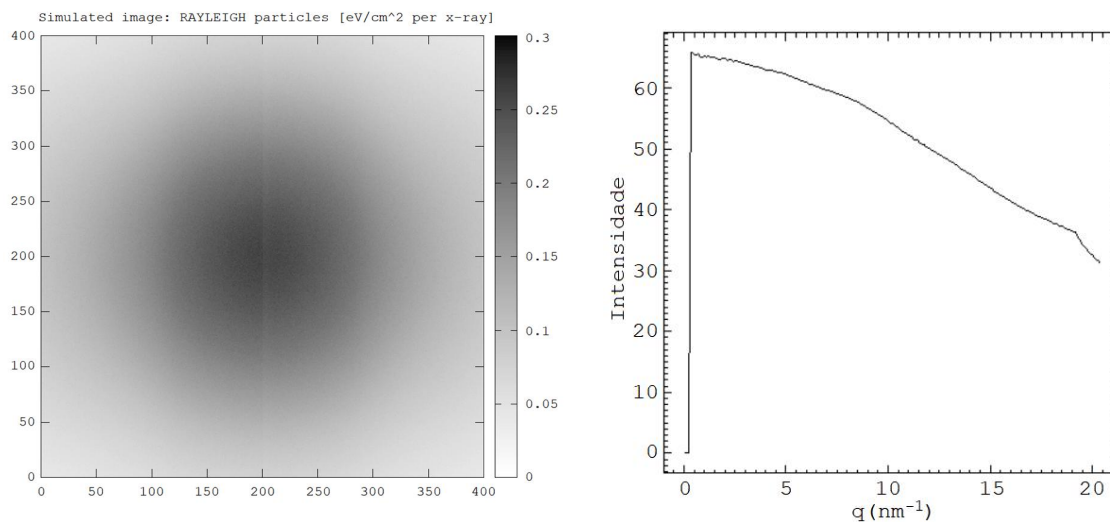


Figura 87 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 24, com a fonte de fótons direcionada para baixo.
Fonte: Autoria própria.

5.7.2 Água e nylon (Combinação 25)

Os materiais internos da Combinação 25 são água e nylon. Na Figura 88, encontra-se o resultado obtido com a fonte de fótons direcionada para cima. E na Figura 89, o resultado obtido com a fonte direcionada para baixo.

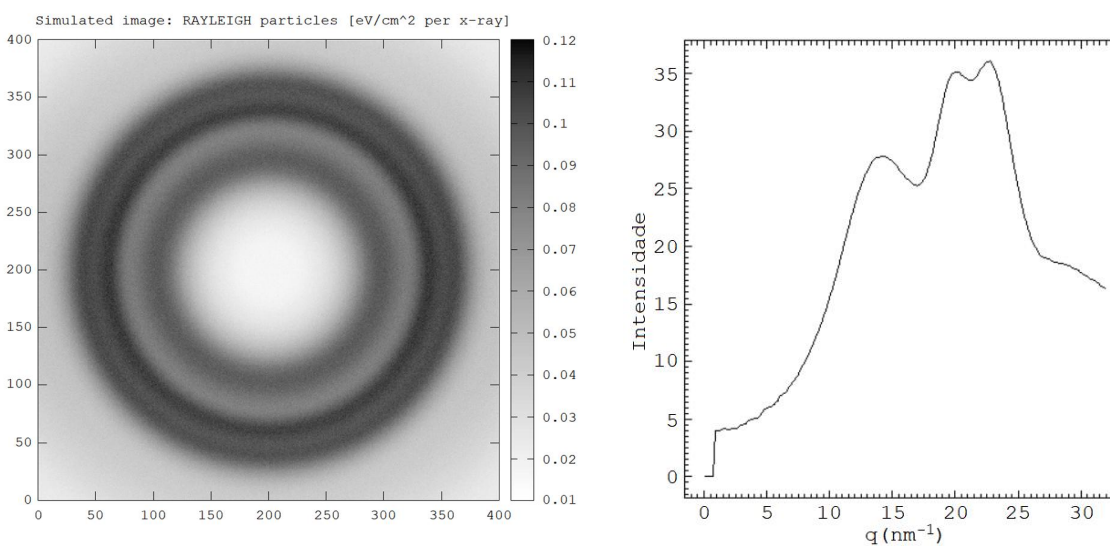


Figura 88 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 25, com a fonte de fótons direcionada para cima.
Fonte: Autoria própria.

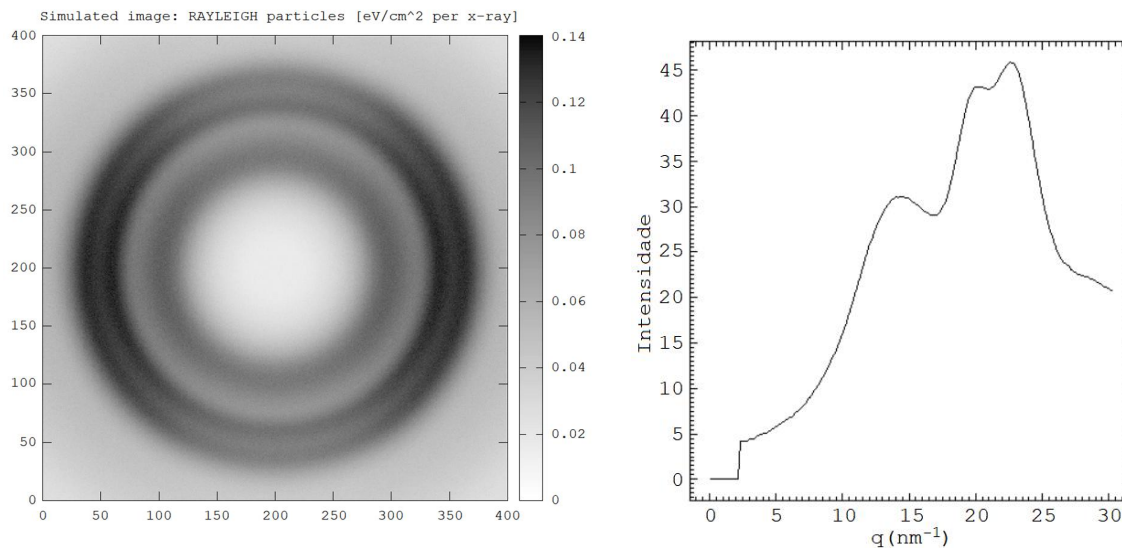


Figura 89 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 25, com a fonte de fótons direcionada para baixo.
Fonte: Autoria própria.

5.7.3 Dimetilformamida e glicerol (Combinação 26)

Os materiais internos da Combinação 26 são dimetilformamida e glicerol. Na Figura 90, encontra-se o resultado obtido com a fonte de fótons direcionada para cima. E na Figura 91, o resultado obtido com a fonte direcionada para baixo.

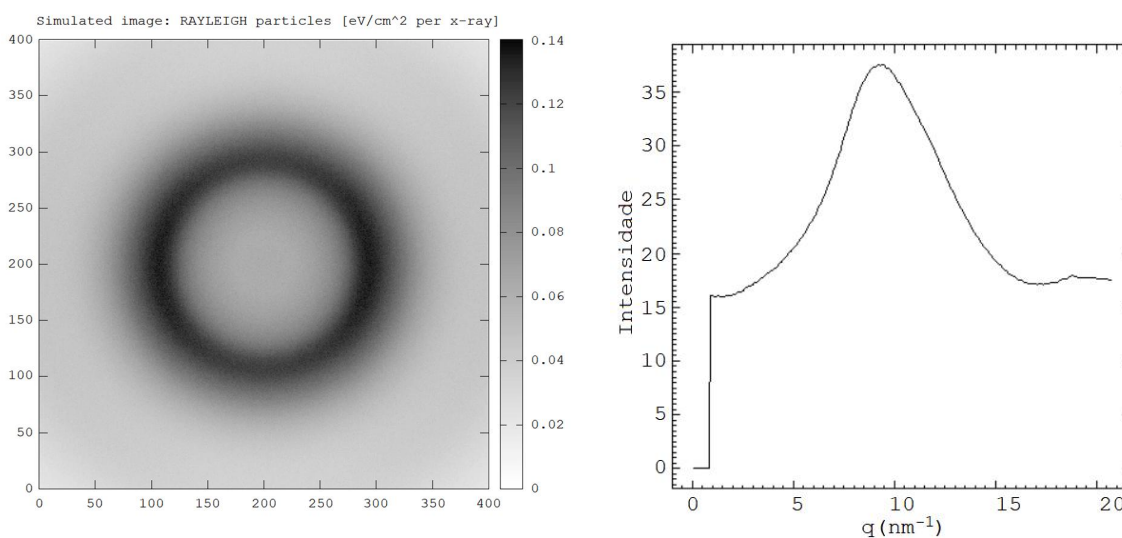


Figura 90 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 26, com a fonte de fótons direcionada para cima.
Fonte: Autoria própria.

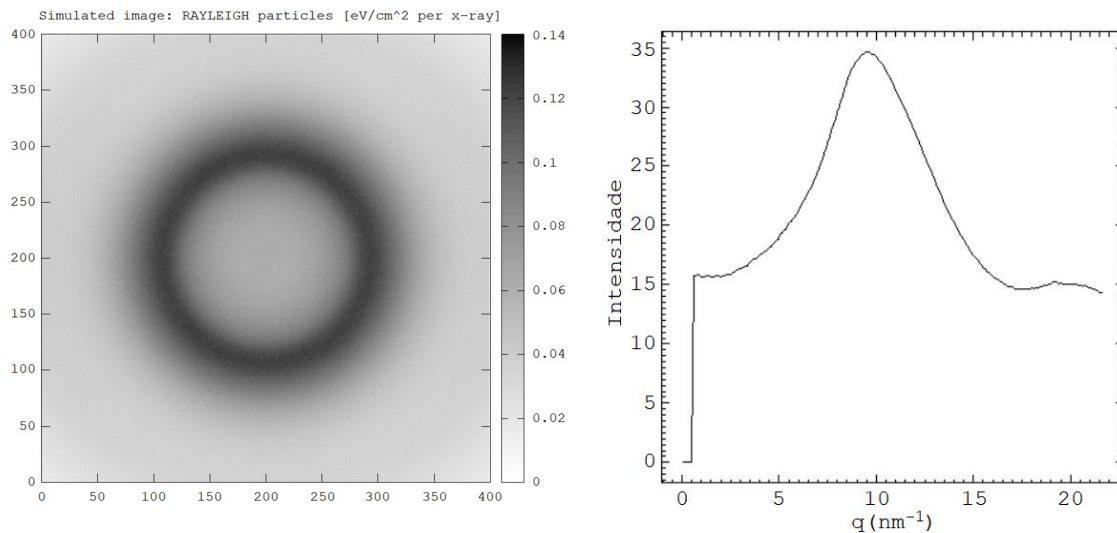


Figura 91 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 26, com a fonte de fótons direcionada para baixo.
Fonte: Autoria própria.

5.7.4 Etanol e glicerol (Combinação 27)

Os materiais internos da Combinação 27 são etanol e glicerol. Na Figura 92, encontra-se o resultado obtido com a fonte de fótons direcionada para cima. E na Figura 93, o resultado obtido com a fonte direcionada para baixo.

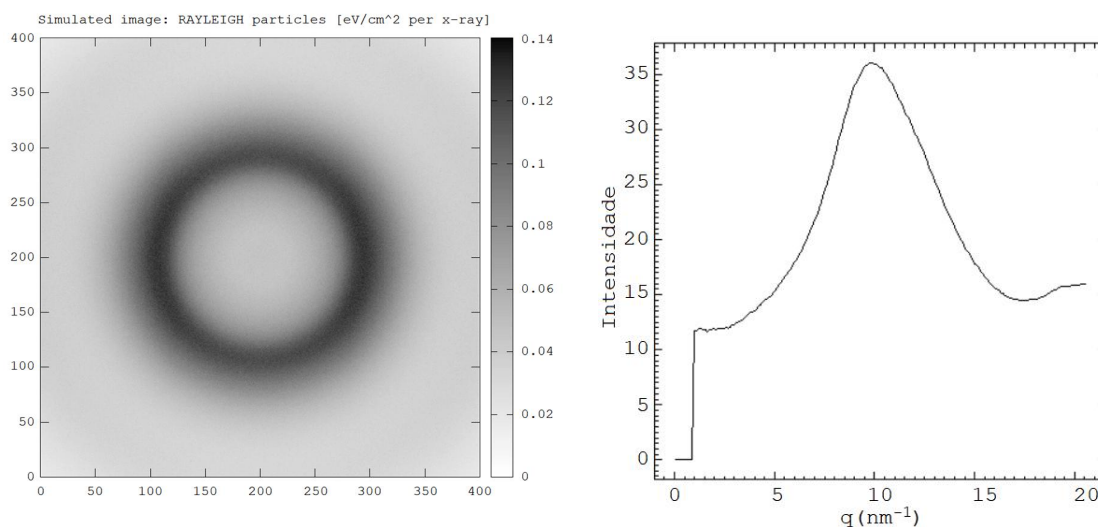


Figura 92 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 27, com a fonte de fótons direcionada para cima.
Fonte: Autoria própria.

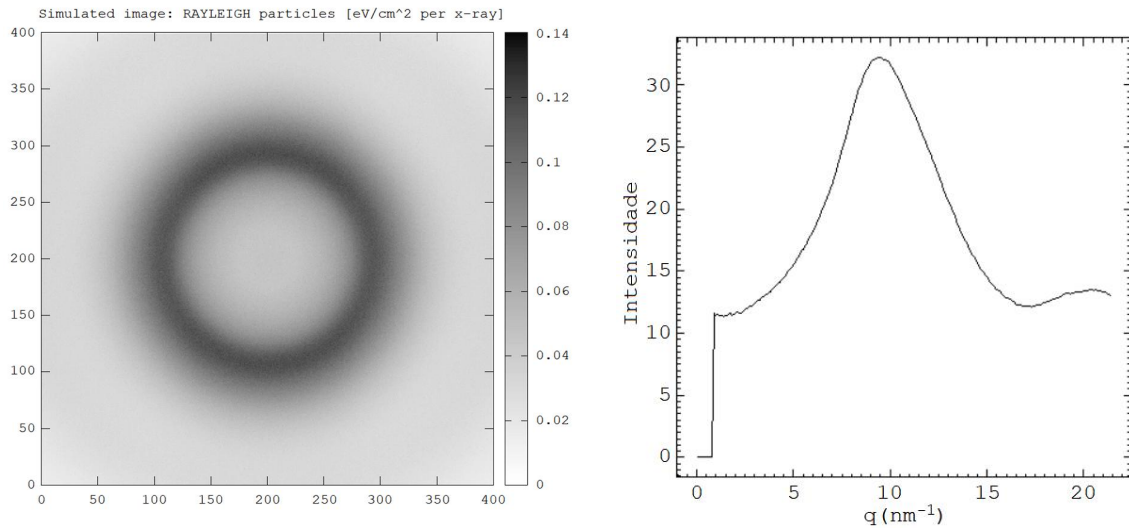


Figura 93 – Padrão de espalhamento Rayleigh (à esquerda) e seu respectivo perfil de espalhamento (à direita) para a Combinação 27, com a fonte de fótons direcionada para baixo.
Fonte: Autoria própria.

5.7.5 Comparação

A seguir, apresentam-se os gráficos de cada uma das combinações em questão, relacionando os perfis de espalhamento com a fonte de fótons direcionada para cima e comparando-os com os perfis de espalhamento com a fonte direcionada para baixo (Gráficos 10 a 13), percebendo-se que foram semelhantes entre si.

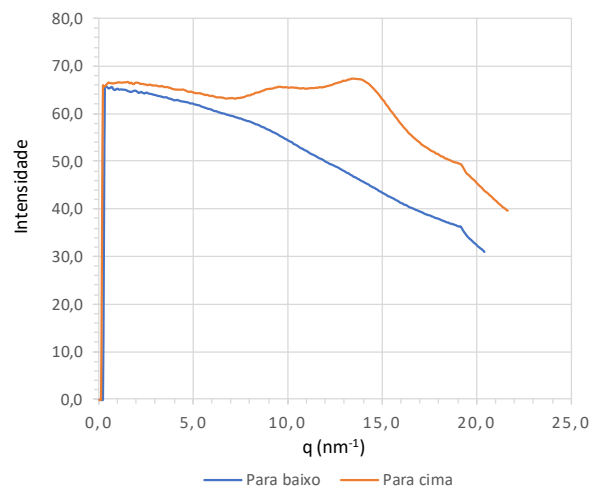


Gráfico 10 – Comparação das simulações na Combinação 24, modificando-se o sentido da fonte.

Fonte: Autoria própria.

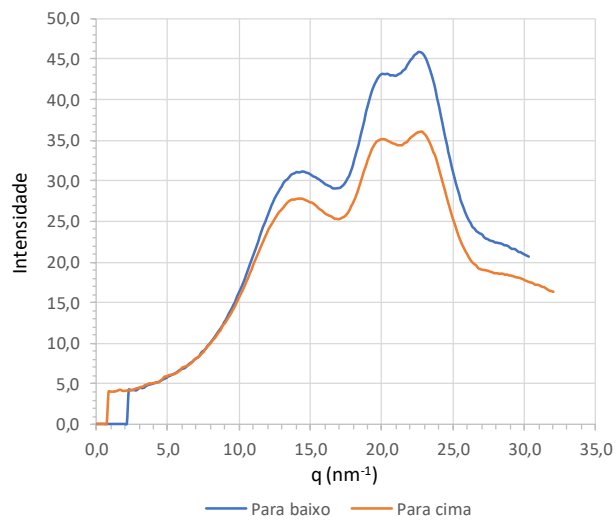


Gráfico 11 – Comparação das simulações na Combinação 25, modificando-se o sentido da fonte.

Fonte: Autoria própria.

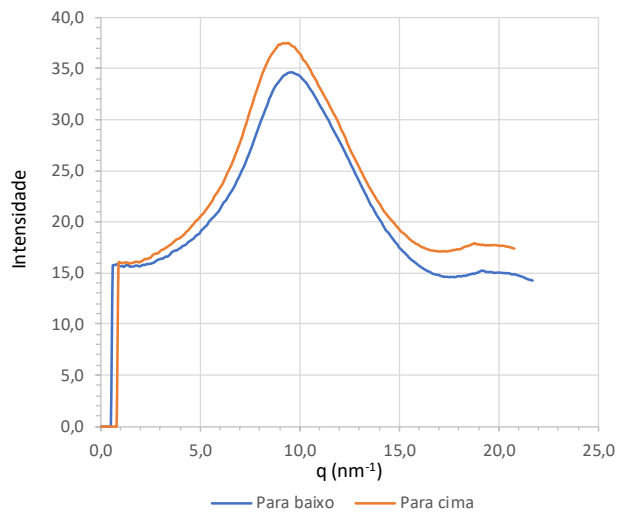


Gráfico 12 – Comparação das simulações na Combinação 26, modificando-se o sentido da fonte.

Fonte: Autoria própria.

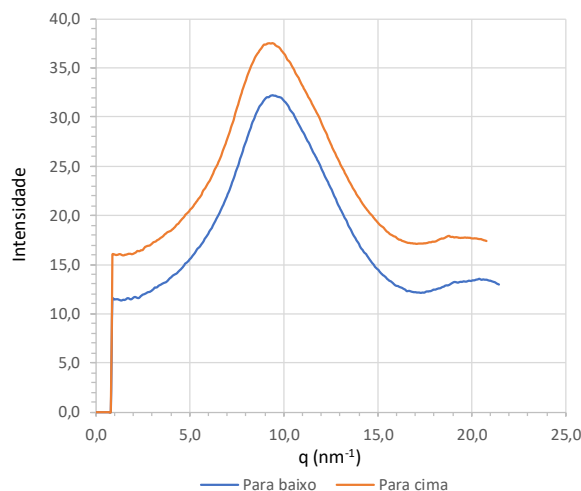


Gráfico 13 – Comparação das simulações na Combinação 27, modificando-se o sentido da fonte.

Fonte: Autoria própria.

5.8 DEMAIS ANÁLISES DOS RESULTADOS

Os resultados obtidos estavam de acordo com a grande maioria das informações apresentadas na literatura. Sendo que os picos foram semelhantes aos valores descritos por demais autores: de pico em $13,9 \text{ nm}^{-1}$ para tecido adiposo, dimetilformamida e etanol, em $20,1 \text{ nm}^{-1}$ para a água (CONCEIÇÃO, 2011), em $16,3 \text{ nm}^{-1}$ para nylon, em $10,0 \text{ nm}^{-1}$ para PMMA (POLLETTI, 2002) e em $15,3 \text{ nm}^{-1}$ para glicerol (OLIVEIRA, 2016).

O tempo de simulação, na maioria das vezes, variou entre 8 e 11 horas, aproximadamente.

Além disso, foi possível mostrar que com o Modelo Atômico Independente (IAA) os resultados não são tão satisfatórios para o reconhecimento de tecidos, pois desprezam as características de arranjo hierárquico dos átomos que compõem cada material.

Com os resultados obtidos com a Função de Interferência Molecular (MIF) foi possível mostrar que é possível utilizar dados reais num *software* computacional, ao invés de apenas se considerar um Modelo Atômico Independente (IAA) para a análise, já que os átomos interagem entre si (Figura 94).

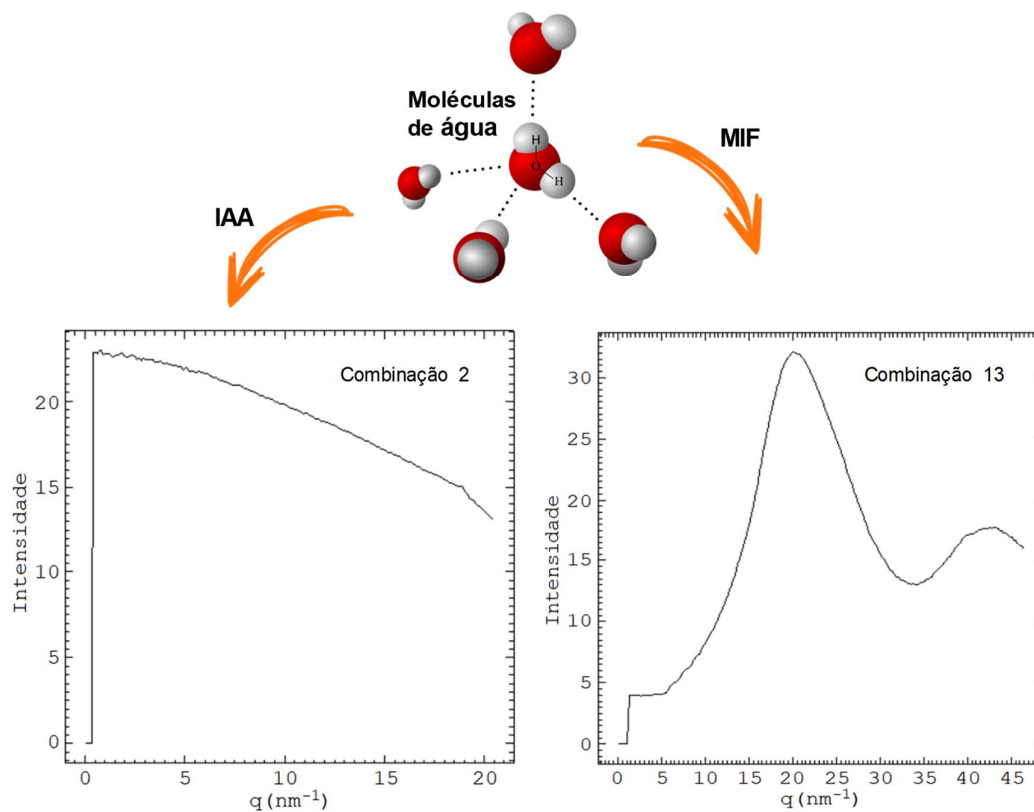


Figura 94 – Grandes diferenças entre perfis de espalhamento com IAA e com MIF. Perfil de espalhamento para água, analisada com IAA (à esquerda) e com MIF (à direita).

Fonte: Autoria própria.

Assim, foram alcançados os objetivos do trabalho, demonstrando que os valores dos perfis de espalhamento característicos de cada material, obtidos com MIF estavam de acordo com os valores mencionados na literatura, caracterizando o arranjo estrutural completo do material em análise.

6 CONCLUSÃO

Com o auxílio do *software* principal utilizado, MC-GPU, foi possível analisar dados obtidos experimentalmente, ou seja, com fator de forma experimental, por código Monte Carlo de simulação. Essas análises computacionais de perfis de espalhamento Rayleigh consideraram a Função de Interferência Molecular (MIF) em seus cálculos, mostrando resultados mais realísticos, quando comparados com os mesmos materiais, porém, com Modelos Atômicos Independentes (IAA), conforme a Figura 94, vista anteriormente.

Os materiais equivalentes, utilizados para confecção de *phantoms* para imagem por absorção, foram simulados em *phantoms* virtuais mostrando graficamente se ainda eram os mais adequados para imagem por espalhamento elástico. Como alguns exemplos, pode-se citar o Gráfico 6, no qual é possível perceber, conforme explicações anteriores, que etanol, dimetilformamida e tecido adiposo possuem picos em $13,9 \text{ nm}^{-1}$, demonstrando uma boa equivalência. Já a água, dentre os materiais analisados, não apresentou equivalência com nenhum outro, apresentando pico em $20,1 \text{ nm}^{-1}$.

O tempo de simulação em média foi de 8 a 11 horas, aproximadamente. Porém as simulações para o material carcinoma demoraram mais, por volta de 24 a 30 horas, quando analisado com MIF. O que deve ser melhor analisado em estudos futuros.

De forma geral, os valores dos perfis de espalhamento característicos de cada material, obtidos com MIF, estavam de acordo com os valores mencionados na literatura, caracterizando a composição do material em análise. Além disso, grande parte dos perfis de espalhamento obtidos com IAA também estavam de acordo com a literatura, mas foram diferentes graficamente do que os com MIF, sendo que nem todos foram encontrados descritos por outros autores. Portanto, este trabalho relaciona os perfis de espalhamento, tanto em MIF quanto em IAA, para os materiais analisados, catalogando os resultados de forma que possa ser utilizado como base de dados em trabalhos futuros.

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O MC-GPU mostrou-se ser uma ferramenta que inclui dados mais realísticos para simular os tecidos, viabilizando a realização de estudos futuros para otimizar construções e análises de perfis de espalhamento, com a utilização de *phantoms* virtuais. Futuramente, pode-se fazer a criação de um banco de dados de fatores de forma (perfis de espalhamento) experimentais, para uso em simulação de interferência por espalhamento elástico.

Além disso, pode-se utilizar análises computacionais similares, com o uso de Função de Interferência Molecular (MIF), para se encontrar dados precisos de amostras a serem levadas para análises experimentais em aceleradores de partículas, otimizando materiais e custos para análises.

REFERÊNCIAS

- ABRAHAMSOHN, P. A. **Epitélios glandulares: parênquima e estroma**. 2016. Disponível em: <<http://www.icb.usp.br/mol/3-18parenq.html>>. Acesso em: 10 fev. 2017.
- AL-BAHRI, J. S.; SPYROU, N. M. Electron density of normal and pathological breast tissues using a Compton scattering technique. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 49, n., p. (12): 1677-1684., 1998.
- ALS-NIELSEN, J; McMORROW, D. **Elements of Modern X-ray Physics**. 2 ed. London: John Wiley & Sons, 2011.
- ANCHAROV, A. I., NIZOVSKII, A.I., GRIDNEV, S.A., FEOFILOV, I.V., VICHKANOV, A.N. An attempt of in vivo X-ray diffraction analysis of kidney stones with the use of synchrotron radiation. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**. 543: 302-305, 2005.
- ANTONIASSI, M. **Determinação das densidades eletrônicas de neoplasias mamárias utilizando o espalhamento Compton de raios-X**. 2008. Dissertação de mestrado. Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto.
- ARRUDA, W. O. Wilhelm Conrad Röntgen: 100 years of X-rays discovery. **Arquivos de Neuro-Psiquiatria**, São Paulo, v. 54, n. 3, p. 525-531, Sept. 1996.
- ATTIX, F.H. **Introduction of radiation physics and radiation dosimetry**. A Wiley. Interscience Publication, Madison, Wisconsin, 1986.
- BADELLI, J. do C. **Desenvolvimento de phantom de mama para estudo de imagens por contraste de fase**. 2017. 84 f. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2017.
- BARNES, G. T. Characteristics of Scatter. **Reduction dose mammography**. Logan WW, Muntz EP. New York: Masson, 223, 1979.
- BATCHELAR, D.L., DAVIDSON, M. T. M., DABROWSKI, W., CUNNINGHAM, I. A. Contrast and scatter in x-ray imaging. **Radiographics** 11(2): 307-323, 1991.

_____. Bone-composition imaging using coherent-scatter computed tomography: Assessing bone health beyond bone mineral density. **Medical Physics**. 33: 904-915, 2006.

BERGER, M. J.; HUBBELL, J. H. XCOM: Photon Cross Section Database. Web Version 1.2. **National Institute of Standards and Technology**, USA, August. 1999.

BINDER, K.; HEERMANN, D. W. Monte Carlo simulation in statistical physics: na introduction. Berlin (Alemanha): Springer, 1988.

BLUM, L. X-Ray scattering from liquids with nearly spherical molecules. **Journal of Computation Physics**, Academic Press, v.7, n.3, p.592-602, 1971.

BRADLEY, D. A. et al. Quantitative measurements of small-angle gamma ray scattering form water, nylon, and Lucite. **Medical Physics** 16 (6): 851-857, 1989.

CAMPELO, C. **Produção de raios X**. 2012. Disponível em: <<http://fisicamed-bio.blogspot.com.br/2012/04/producao-de-raios-x.html>>. Acesso em: 10 mar. 2017.

CASTRO, C. R. F.; BARROSO, R. C.; LOPES, R. T. Scattering signatures for some human tissues using synchrotron radiation. **X-Ray Spectrometry** 34 (6): 477-480, 2005.

CECCHI, A.; TEIXEIRA, C.; RODRIGUES, E. **Formação do feixe de raio X**. 2016. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=-ocDOjcXlcA>>. Acesso em: 10 fev. 2017.

CHAN, H-P.; DOI, K. The validity of Monte Carlo simulation in studies of scattered radiation in diagnostic radiology. **Physics in medicine and biology**, v.28, n.2, p.109-129, 1983.

CONCEIÇÃO, A. L. C. **Caracterização estrutural de tecidos mamários normais e neoplásicos através de espalhamento de raios X**. 2008. 103 f. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2008.

_____. **Estudo das organizações moleculares e supramoleculares de tecidos mamários normais e neoplásicos por espalhamento de fótons**. 2011. 89 f. Tese (Doutorado em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2011.

_____. **Dosimetria e proteção radiológica:** aula 3. 2016a. Disponível em: <http://paginapessoal.utfpr.edu.br/alconceicao/pos-graduacao/disciplinas/dosimetria-e-protacao-radiologica/aulas/Aula3.pdf/at_download/file>. Acesso em: 10 jul. 2016.

_____. **Dosimetria e proteção radiológica:** aula 5. 2016b. Disponível em: <http://paginapessoal.utfpr.edu.br/alconceicao/pos-graduacao/disciplinas/dosimetria-e-protacao-radiologica/aulas/Aula5.pdf/at_download/file>. Acesso em: 10 jul. 2016.

CONCEIÇÃO, A. L. C., ANTONIASSI, M., POLETTI, M. E. Analysis of breast cancer usingsmall angle x-ray scattering (SAXS). **Analyst**, 134, 1077-1082, 2009.

CONCEIÇÃO, A. L. C.; POLETTI, M. E. Identification of molecular structures of normal and pathological human breast tissue using synchrotron radiation. **AIP Conference Proceedings** 1266, 72-78, 2010a.

CONCEIÇÃO, A. L. C. et al.. Multivariate Analysis of the Scattering Profiles of Healthy and Pathological Human Breast **Tissues**. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**. doi:10.1016/j.nima.2010.08.060. 2010b.

COSTA, C. A. da. **Dor nas mamas**. 2004. Disponível em: <http://www.drcarlos.med.br/artigo_016.html>. Acesso em: 15 ago. 2017.

COSTA, D. S. **Projeto e construção de uma câmara para estudos por gisaxs a altas temperaturas e estudo *in situ* por gisaxs da cinética de crescimento de nanopartículas em filme fino de SiO₂-Co depositado sobre si**. 2014. Disponível em: <<http://www.pipe.ufpr.br/portal/defesas/dissertacao/263.pdf>>. Acesso em: 01 jan 2018.

CULLITY, B. D. **Elements of x-ray diffraction**. Addison-wesley publishing company, Massachussets, 1978.

CUNHA, D. M., TOMAL, A., POLETTI, M. E. Evaluation of scatter-to-primary ratio, grid performance and normalized average glandular dose in mammography by Monte Carlo simulation including interference and energy broadening effects. **Physics in Medicine and Biology** 55: 4335-4346, 2010.

CUNHA, D. M. et al. X-ray scattering profiles of some normal and malignant human breast tissue. **X-ray Spectrometry** 35: 370-374, 2006.

DUKE, P. J. **Synchrotron Radiation: Production and Properties**. Oxford Series on Synchrotron Radiation. n. 3. New York: Oxford University Press, 2000.

EVANS, S.H., BRADLEY, D., DANCE, D.R., BATERMAN, J.E. e JONES, C.H. Measurements of small-angle photon scattering for some breast tissues and tissue substitute materials. **Physics in Medicine and Biology** 36 (1): 7-18, 1991.

FERNÁNDEZ, M. et al. Small-angle x-ray scattering studies of human breast tissue samples. **Physics in Medicine and Biology** 47: 577-592, 2002.

_____. Human breast tissue characterisation with small-angle X-ray scattering. **Spectroscopy** 18 (2): 167-176, 2004.

FOGAÇA, J. R. V. **Polimetilmetacrilato (acrílico)**. 2017. Disponível em: <<http://alunoonline.uol.com.br/quimica/polimetilmetacrilato-acrilico.html>>. Acesso em: 15 set. 2017.

FUNDAÇÃO DO CÂNCER. **10 números preocupantes sobre câncer de mama no Brasil e no mundo**. 2016. Disponível em: <<https://www.cancer.org.br/10-numeros-preocupantes-sobre-cancer-de-mama-no-brasil-e-no-mundo/>>. Acesso em: 20 set. 2017.

GERALDELLI, W. **Desenvolvimento e aplicação de um sistema de raios x dispersivo em energia para determinação do coeficiente de atenuação linear e do perfil de espalhamento de neoplasias mamárias**. 2012. Disponível em: <www.teses.usp.br/teses/disponiveis/59/59135/tde-22072013/WenderGeraldelli.pdf>. Acesso em: 20 jan. 2018.

GIOVANNI, J. R.; BONJORNIO, J. R.; GIOVANNI JUNIOR, J. R. **Matemática fundamental, 2º grau**: volume único. São Paulo: FTD, 1994.

GLATTER, O.; KRATKY, O. **Small-angle x-ray scattering**. Academic Press London, 1982.

GRIFFITHS, J. A. et al. Correlation of energy dispersive diffraction signatures and microCT of small breast tissue samples with pathological analysis. **Physics in Medicine and Biology** 52: 6151-6164, 2007.

GUINIER, A. **X-Ray diffraction: in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies**. New York: H. Freeman and Company, 1994.

GÜRSOY, T. et al. Maximum a posteriori estimation of crystallographic phases in X-ray diffraction tomography. **Philosophical transactions of the Royal Society A**, London (Reino Unido), p. 1-10, fev. 2015. 373:20140392. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1098/rsta.2014.0392>>. Acesso em: 20 set. 2017.

HAMMERSLEY, A. **The cake command**. 2004. Disponível em: <http://www.esrf.eu/computing/scientific/FIT2D/FIT2D_REF/node53.html>. Acesso em: 25 set. 2017.

HANSON, A. L. The calculation of scattering cross sections for polarized X-rays. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, 1986.

HAUS A. G.; CULLINAN J. E. Recording the Image. **A History of the Radiological Sciences**. Ed. McClennan B.L. Radiology Centennial, INC. Reston, VA, 1996.

HUBBELL, J. H. Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions and Photon Scattering Cross Sections. **Journal of Physical and Chemical Reference Data** 4 (3): 471-538, 1975.

HUBBELL, J. H.; OVERBO, I. Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross sections. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, AIP Publishing, v.8, n.1, p.69, 1979.

INSTITUTO NACIONAL DE CÂNCER JOSÉ ALENCAR GOMES DA SILVA (INCA). **Câncer de mama**. 2016. Disponível em: <<http://www.inca.gov.br/outubro-rosa/cancer-mama.asp>>. Acesso em: 10 out. 2017.

_____. **Câncer de pele não melanoma**. 2017. Disponível em: <http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/tiposdecancer/site/home/pele_ao_melanoma>. Acesso em: 10 out. 2017.

_____. **Mama**. 2017. Disponível em: <http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/tiposdecancer/site/home+/mama/cancer_mama>. Acesso em: 10 out. 2017.

INSTITUTO RONALD McDONALD. **A neoplasia**. 2017. Disponível em: <<http://www.casaronald.org.br/casa/neoplasia>>. Acesso em: 10 out. 2017.

INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION UNITS AND MEASUREMENTS (ICRU). Tissue substitutes in radiation dosimetry and measurement. **ICRU Report 44**. ICRU (1989).

ISBRASIL. **Como capturar uma imagem de sua tela (printscreen)**. 2017. Disponível em: <<https://www.isbrasil.info/ajuda/dicas-especiais/como-capturar-uma-imagem-de-sua-tela-printscreen.html>>. Acesso em: 10 out. 2017.

JOHNS, H. E.; CUNNINGHAM, J. R. **The Physics of Radiology**. Springfield: Charles C. Thomas, 1983.

JOHNS, P. C. e YAFFE, M. J. Coherent scatter in diagnostic radiology. **Medical Physics** 10 (1): 40-50, 1983.

KANE, P. P., KISSEL, L., PRATT, R. H. e ROY, G. J. Elastic scattering of γ -ray and x-ray by atoms. **Physics Reports** 140 (2): 75-159, 1985.

KIDANE, G. et al. X-ray scatter signatures for normal and neoplastic breast tissues. **Physics in Medicine and Biology** 44: 1791-1802, 1999.

KLUG, H. P. e ALEXANDER, L. E. **X-ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials**. 2 ed. New York: John Wiley & Sons, 1974.

KOCH, H. A. et al. Radiologia da mama: qualidade em mamografia. **Radiologia Brasileira** 29 (5): 257-269, 1996.

KOSANETZKY, J. et al. X-ray diffraction measurements of some plastic materials and body tissues. **Medical Physics** 14 (4): 526-532, 1987.

KRAMER, G. H.; CROWLEY, P.; BURNS, L. C. Investigating the impossible: Monte Carlo simulation, **Radiation Protect Dosimetry**, vol. 89 (3-4), p. 259-262, 2000.

KRAPAS, S.; DOS SANTOS, P. A. M. **Modelagem do espalhamento rayleigh da luz com propósitos de ensino e aprendizagem**. 2002. Disponível em: <<https://unirioja.es/download/articulo/5166009.pdf>>. Acesso em: 05 jan 2018.

LABORATÓRIO DE IMAGEM E ESPECTROSCOPIA DE RAIOS X (LIERX). **Notas de pesquisa**. Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e Informática Industrial. UTFPR, Curitiba, 2017.

LEWIS, R. A. et al. Breast cancer diagnosis using scattered X-rays. **Journal of Synchrotron Radiation** 7: 348-352, 2000.

LIMA, A. G. G. **Espectro eletromagnético**. 2015. Disponível em: <<http://www.antonio.guilherme.web.br.com/blog/materiais/particulas-ateriais/espectro-eletromagnetico/>>. Acesso em 10 dez. 2017.

LOPES, C. V. M; MARTINS, R. A. J. J. **Thomson e o uso de analogias para explicar os modelos atômicos: o 'pudim de passas' nos livros texto**. 2009. Disponível em: <<http://posgrad.fae.ufmg.br/posgrad/viiienpec/pdfs/1682.pdf>>. Acesso em: 01 jan 2018.

MACEDO, L. L. **Análise de tecido mamário neoplásico canino a partir da técnica de difração de raios-x**. 2016. Dissertação de mestrado. Programa de pós-graduação em engenharia elétrica e informática industrial, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba.

MAGALHÃES, S. D., EICHLER, J. e GONÇALVES, O. D. Calculation of x-ray scattering of 17.4 keV radiation and image degradation in mammography. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B** 95: 87-90, 1995.

MICHAELSON, J. S. et al. Predicting the survival of patients with breast carcinoma using tumor size. **Cancer** 95 (4): 713-723, 2002.

MORIN, L. R. M. Molecular Form Factors and Photon Coherent Scattering Cross Sections of Water. **Journal of Physical and Chemical Reference Data** 11 (4): 1091-1098, 1982.

MUSHLIN, A. I.; KOUIDES, R. W; SHAPIRO, D. E. Estimating the accuracy of screening mammography A meta-analysis. **American Journal of Preventive Medicine** 14 (2): 143-153, 1998.

NARTEN, A. H. e LEVY. H. A. Liquid Water: Molecular Correlation Functions from X-Ray Diffraction. **The Journal of Chemical Physics** 55 (5): 2263-2269, 1971.

NIST. **Fundamental Physical Constants**: Planck constant in EV s. 2017. Disponível em: <<https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?hev>>. Acesso em: 22 out. 2017.

O KUADRO. **Equação reduzida da circunferência**. 2013. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=4jnGRvAzsTk>>. Acesso em: 22 out. 2017.

OLIVEIRA, A. C. H. de et al. Construção de fantasmas físicos para avaliação dosimétrica em planejamentos radioterápicos: o fantoma Hydra. Conference Paper, Lisboa (Portugal), **III Congresso de Proteção Contra Radiações dos Países e Comunidades de Língua Portuguesa**, nov. 2012.

OLIVEIRA, N. M. P. de. **Difração de raios X em materiais equivalentes ao tecido mamário**. 2016. 46 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Curso Superior de Tecnologia em Radiologia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2016.

OLIVEIRA, O. R. de. **Determinação experimental dos perfis de espalhamento de tecidos mamários (normais e alterados) e sua potencialidade como ferramenta de diagnóstico**. 2006. Dissertação de mestrado. Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto.

OLIVEIRA, O. R. et al. Identification of neoplasias of breast tissue using a commercial powder diffractometer. **Journal of Radiation Research** (*In press*). 2008.

PALTANI, S. **Monte Carlo methods**. 2011. Disponível em: <https://www.unige.ch/sciences/astro/files/2713/8971/4086/3_Paltani_MonteCarlo.pdf>. Acesso em: 22 out. 2017.

PAULA, R. R. de. **Método de Monte Carlo e aplicações**. 2014. 81 f. Monografia (Graduação em Matemática com Ênfase em Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2014.

PEPLOW, D.E. e VERGHESE, K. Measured molecular coherent scattering form factors of animal tissues, plastics and human breast tissue. **Physics in Medicine and Biology** 43: 2431-2452, 1998.

PIANOSCHI, T. A. **Avaliação do código de simulação Monte Carlo PENELOPE para aplicações em geometrias delgadas e feixes de radiodiagnóstico**. 2008. 66 f. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2008.

POLETTI M.E. **Análise do contraste, dose e desempenho de uma grade relacionada ao espalhamento na imagem mamográfica**. 1997. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 1997.

_____. **Estudo do Espalhamento de Fótons (6,94, 17,44 e 59,54 keV) em Tecidos Mamários, Materiais Equivalentes e sua Influência em Mamografia**. 2001. 91 f. Tese (Doutorado em Física) – Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2001.

POLETTI, M.E.; GONÇALVES, O.D.; MAZZARO, I. Coherent and incoherent-scattering of 17.44 and 6.93 keV X-ray photons scattered from biological and biological-equivalent samples: characterization of tissues. **X-ray Spectrometry** 31: 57-61, 2002a.

_____. X-Ray Scattering from Human Breast Tissues and Breast-Equivalent Materials. **Physics in Medicine and Biology** 47: 47-63, 2002b.

_____. Measurements of X-ray scatter signatures for some tissue-equivalent materials. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B** 213: 595-598, 2004.

POLETTI, M.E. et al. Precise evaluation of elastic differential scattering cross-sections and their uncertainties in X-ray scattering experiments. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B** 187: 437-446, 2002c.

PRITSIVELIS, C.; MACHADO, R. H. S. **Ginecologia fundamental: embriologia, anatomia e fisiologia da mama.** 2017. Disponível em: <<https://docslide.com.br/documents/04-embriologia-anatomia-e-fisiologia-da-mama.html>>. Acesso em: 07 nov. 2017.

PROCÓPIO, R. **Teorema de Pitágoras com Exemplos e Exercícios | Matemática do ENEM.** 2015. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=JcX2mtRDtCc>>. Acesso em: 12 nov. 2017.

PUC-RIO. **Método de Monte Carlo.** 2017. Disponível em: <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/19632/19632_4.PDF>. Acesso em: 12 nov. 2017.

RAUEN, C. V. **O projeto Sirius e as encomendas tecnológicas para a construção da nova fonte de luz síncrotron brasileira.** 2015. Disponível em: <http://www.ipea.gov.br/agencia/images/stories/PDFs/livros/livros/politicas_de_inovacao_cap08.pdf>. Acesso em: 20 dez. 2017.

ROBBINS, S. L.; COTRAN, R. S. **Patologia: bases patológicas das doenças.** 8 ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2010.

ROGERS, D. W. O. Review: Fifty years of Monte Carlo simulations for medical physics, **Physics, Medicine and Biology**, vol. 51, pp. r287-r301, 2006.

ROUND, A.R. et al. A preliminary study of breast cancer diagnosis using laboratory based small angle Xray scattering. **Physics in Medicine and Biology** 50: 4159-4168, 2005.

ROYLE, G. J., SPELLER, R. D. Quantitative X-ray diffraction analysis of bone and marrow volumes in excised femoral head samples. **Physics in Medicine and Biology**. 40: 1487-1495, 1995.

RYAN, E. A.; FARQUHARSON, M. J. Breast tissue classification using scattering measurements and multivariate data analysis. **Physics in Medicine and Biology** 52: 6679-6696, 2007.

SAINT LUKE'S HEALTH SYSTEM. **Breast anatomy**. 2017. Disponível em: <<https://www.saintlukeshealthsystem.org/health-library/breast-anatomy>>. Acesso em: 12 nov. 2017.

SANTOS, A. C. F dos. **Capítulo 11 - Interação de fótons com a matéria**. 2008. Disponível em: <http://www.if.ufrj.br/~toni/capitulo_11.pdf>. Acesso em: 20 dez 2018.

SATO, K. A. ; PIRES, M. R. ; CRUZ, J. V. ; CONCEIÇÃO, A. L. C. . Simulação de imagens por espalhamento elástico de raios X de materiais equivalentes à tecido mamário humano. In: XXII **Congresso Brasileiro de Física Médica**, 2017, Ribeirão Preto. Book of Abstracts of XXII CBFM, 2017.

SEIDMAN, H.; STELLMAN, S. D; MUSHINSKI, M. H. A different perspective on breast cancer risk factors: some implications of the nonattributable risk. **CA: A Cancer Journal for Clinicians** 32 (5): 301-313, 1982.

SETIANI, T. D.; SUPRIJADI; HARYANTO, F. Study on efficiency of time computation in x-ray imaging simulation base on Monte Carlo algorithm using graphics processing unit. **AIP Conference Proceedings** 1719: 030007, 2016.

SOCIEDADE BRASILEIRA DE MASTOLOGIA. **Estádios do câncer de mama**. 2018. Disponível em: <http://www.sbmastologia.com.br/index.php?option=com_content&view=article&id=883:estadios-do-cancer-de-mama&catid=152&Itemid=706>. Acesso em: 21. dez. 2017.

SIU, K.K. W. et al. Identifying markers of pathology in SAXS data of malignant tissues of the brain. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**. 548: 140-146, 2005.

SOUHAMI, R.; TOBIAS, J. **Cancer and Its Management**. London: Blackwell Science Ltd, 1998.

SPELLER, R. D. Tissue analysis using x-ray scattering. **X-ray Spectrometry** 28: 244-250, 1999.

TARTARI, A. Molecular differential cross-sections for low angle photon scattering in tissues. **Radiation Physics and Chemistry** 56: 205-211, 1999.

TARTARI, A. et al. Photon cross-sections data from X-Ray Diffraction Pattern Measurements: correction procedure evaluations. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B** 142: 203-209, 1998.

TARTARI, A. et al. Photon Scattering by Compounds: na Assesment of the Validity of the Independent Atomic Model Approximation. **X-ray Spectrometry** 26: 169-173, 1997a.

TARTARI, A. et al. Molecular differential cross sections for x-ray coherent scattering in fat and polymethyl methacrylate. **Physics in Medicine and Biology** 42: 2551-2560, 1997b.

TARTARI, A. et al. Molecular coherent scattering data for tissue in photon transport monte carlo codes. **Applied Radiation and Isotopes** 53: 901-906, 2000.

TARTARI, A. et al. Updating of form factor tabulations for coherent scattering of photons in tissues. **Physics in Medicine and Biology** 47: 163-175, 2002.

TOMAL, A. **Medidas experimentais dos coeficientes de atenuação de tecidos mamários e sua influência no contraste e dose mamografia**. 2007. Dissertação de mestrado. Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ (UFPR). **Espectroscopia de raios-X**. Disponível em: <http://fisica.ufpr.br/grad/espectroscopia_rx.pdf>. Acesso em: 15 dez. 2017.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. **Produção de Raios X**. Disponível em: <https://www.if.ufrgs.br/tex/fis142/fismod/mod05/m_s01.html>. Acesso em: 20 dez. 2017.

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ (UTFPR). **Espectro do feixe de raios X e suas propriedades**. Disponível em: <<http://rle.dainf.ct.utfpr.edu.br/hipermidia/index.php/radiologia-convencional/tecnologia-e-funcionamento-dos-equipamentosrx/tubo-de-raios-x/espectro-do-feixe-de-raios-x>>. Acesso em: 10 mar. 2017.

VAILIONIS, A. **Diffraction: geometry, optics and detectors**. 2016. Disponível em: <http://web.stanford.edu/group/glam/xlab/MatSci162_172/LectureNotes/>. Acesso em: 03 fev. 2018.

VIANNA, L. B. **Velocidade da luz**. 2017. Disponível em: <<https://www.infoescola.com/fisica/velocidade-da-luz/>>. Acesso em: 10 fev. 2017.

VIVA O LINUX. **O que é o terminal**. 2009. Disponível em: <<https://www.vivaolinux.com.br/topico/Comandos/o-que-e-o-terminal>>. Acesso em: 21 dez. 2017.

WANG, B.; XU, G.; KIM, C-H. Monte Carlo study of mosfet dosemeter characteristics: dose dependence on photon energy, direction and dosemeter composition, **Radiation Protection Dosimetry**, vol. 113 (1), p. 40-46, 2005.

GLOSSÁRIO

Câncer de pele não melanoma: É o câncer mais frequente no Brasil e corresponde a 30% de todos os tumores malignos registrados no país. Apresenta altos percentuais de cura, se for detectado precocemente. Entre os tumores de pele, o tipo não-melanoma é o de maior incidência e mais baixa mortalidade (INCA, 2017).

Carcinoma: Os neoplasmas malignos de origem nas células epiteliais, derivados de qualquer uma das três camadas germinativas (ectoderme, mesoderme ou endoderme), são denominados carcinomas. Portanto, o câncer que surge na epiderme de origem ectodérmica é um carcinoma, assim como o câncer que se origina nas células dos túbulos renais derivados da mesoderme e nas células do revestimento do trato gastrointestinal derivados da endoderme (ROBBINS e COTRAN, 2010).

Estádios do câncer de mama: Os estádios do câncer de mama são formas que os médicos se utilizam para dar notas ao estado da doença do paciente e são divididos em 5 tipos (SOCIEDADE BRASILEIRA DE MASTOLOGIA, 2017):

- **Estádio 0:** quando a doença esta restrita ao local onde começou (carcinomas *in situ*);
- **Estádio 1:** a doença invadiu a região local, mas possui no máximo 2 cm de tamanho (carcinomas invasivos, que tem chance de mandar células para outras partes do corpo);
- **Estádio 2:** a doença invadiu a região local, mas possui entre 2 e 5 cm de tamanho e ínguas pouco comprometidas na axila (carcinomas invasivos);
- **Estádio 3:** a doença invadiu a região local, mas possui tamanho maior que 5 cm ou ínguas muito comprometidas na axila (carcinomas invasivos);
- **Estádio 4:** quando a doença invadiu outras partes do corpo, como ossos, pulmões, fígado, etc.

Estroma: É a porção que realiza a sustentação do órgão. É constituído por tecido conjuntivo que existe em volta e entre as porções secretoras e os ductos. Sua função é dar suporte à glândula, manter unidas suas diferentes partes, conduzir vasos, nervos e ductos excretorios e eventualmente recobrir a glândula como um todo formando uma cápsula (ABRAHAMSOHN, 2016).

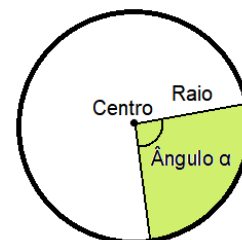
Neoplasia: Neoplasia ou câncer é o nome dado a um conjunto de doenças que têm em comum o crescimento desordenado de células malignas que invadem os tecidos e órgãos. Dividindo-se rapidamente, estas partículas tendem a ser muito agressivas e incontroláveis. O acúmulo de células provoca a formação de tumores que podem ser malignos, quando são células cancerosas, ou benignos, quando se refere a uma massa de células que se multiplicam lentamente e se assemelham ao seu tecido original, raramente constituindo um risco de vida (INSTITUTO RONALD McDONALD, 2017).

Parênquima: É a porção constituída pelas células características de um órgão. Se for uma glândula exócrina é a porção constituída pelas células secretoras e ductos. Se for uma glândula endócrina são as células secretoras. É, portanto, a parte funcional do órgão, que exerce as funções típicas daquele órgão (ABRAHAMSOHN, 2016).

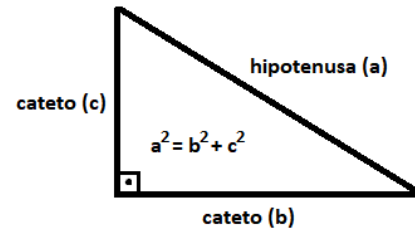
PMMA: O PMMA é um polímero sintético (fibra sintética), e seu nome científico segundo a IUPAC é “poli(metil-2-metilpropenoato)”, comercialmente chamado de “acrílico”, mas também conhecido como “polimetilmetacrilato”. É um material termoplástico rígido, transparente e incolor, podendo se considerar como um dos polímeros mais modernos e com maior qualidade do mercado, por sua facilidade de adquirir formas, por sua leveza e alta resistência (FOGAÇA, 2017).

Print Screen: Existe nos teclados de computador uma tecla chamada “Print Screen”. No Windows, esta tecla serve para capturar em forma de imagem tudo o que está presente na tela, com exceção do ponteiro do mouse, fazendo uma cópia para a Área de Transferência. Para salvar seu conteúdo, basta colar em algum programa que suporte imagens, tais como o Microsoft Paint, por exemplo, que já vem instalado no Windows (ISBRASIL, 2017).

Setor circular: Um círculo inteiro é formado por 360° . Um setor circular é formado por parte de um círculo, de maneira que esse ângulo (ângulo α , conforme a figura ao lado) seja menor que 360° . Um exemplo de setor circular é a parte colorida da figura (GIOVANNI; BONJORNO; GIOVANNI JUNIOR, 1994, p. 434).



Teorema de Pitágoras: Conforme a imagem ao lado, dado um triângulo retângulo, o lado oposto ao ângulo reto é sua hipotenusa e os demais lados do triângulo são seus catetos. Sabendo-se isso, o Teorema de Pitágoras é definido por: “A soma dos quadrados dos catetos de um triângulo retângulo é igual ao quadrado de sua hipotenusa.”. (PROCÓPIO, 2015).



Terminal: É um emulador de linha ou “prompt de comando”, onde todos os comandos são emitidos em texto puro. É equivalente ao “prompt de comando” do Sistema Operacional Windows. Leigamente vista como a “tela preta” de comandos no Linux (VIVA O LINUX, 2009).

APÊNDICE A – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE PENELOPE, VERSÃO 2006 (ETAPA 1)

Para se utilizar o *software* PENELOPE 2006, primeiramente deve-se abrir no terminal do Sistema Operacional Linux a pasta [...] /PENELOPE2006/penelope/pendbase (Figura 95) e então executar o comando “./material_with_MIF.x” (sem as aspas), pois o programa material_with_MIF.x (Figura 96), portanto, é um arquivo executável, que deve estar na pasta “pendbase” mencionada.



Figura 95 – Destaque para a pasta “pendbase”.

Fonte: PENELOPE (2006).



Figura 96 – Ícone do programa “material_with_MIF.x”.

Fonte: PENELOPE (2006).

Nesta etapa, são requisitados dados a respeito de cada um dos materiais necessários para a análise. Basicamente, duas decisões importantes precisam ser definidas no programa:

1. O usuário informará novos compostos ou utilizará átomos/compostos já existentes na biblioteca do programa?
2. O usuário deseja analisar os dados com Função de Interferência Molecular ou com Modelo Atômico Independente?

Essas duas decisões estão explicadas nos Apêndices A.1 e A.2. O arquivo de saída está melhor descrito no Apêndice A.3.

APÊNDICE A.1 – DEFINIÇÃO DOS ÁTOMOS E COMPOSTOS (ETAPA 1.1)

Conforme a Figura 27, vista anteriormente, ao se iniciar o programa (Etapa 1.1), a primeira decisão que deve ser selecionada é se o átomo ou composto a ser analisado será informado a partir de sua fórmula estequiométrica (opção 1) ou se será proveniente da própria biblioteca do programa (opção 2). O questionamento, em sua forma original, com as opções mencionadas, pode ser visto na Figura 97.

```
Select one option (1 or 2):  
1: Enter composition data from the keyboard  
2: Read them from the file pdcompos.p06
```

Figura 97 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição da criação ou do uso de biblioteca pronta de átomos e compostos.

Fonte: PENELOPE (2006).

De acordo com a decisão tomada pode-se seguir o caminho do Apêndice A.1.1 ou o caminho do Apêndice A.1.2.

APÊNDICE A.1.1 – Informando novos compostos

Para informar novos compostos, deve-se selecionar a opção 1 do questionamento mostrado na Figura 97. Nesta opção, deve-se informar o nome do material para as informações que serão inseridas no programa, não podendo conter mais do que 60 caracteres (Figura 98).

```
Enter material name, for your information (no more than 60 characters) ...
```

Figura 98 – Trecho do PENELOPE 2006 solicitando o nome do material.

Fonte: PENELOPE (2006).

Para exemplificar, pode-se citar o caso do PMMA. Ao se informar o nome do material (“PMMA”), será solicitado o número de elementos da molécula (Figura 99), que é 3 (três), visto que são três elementos (Carbono, Hidrogênio e Oxigênio).

```
Chemical formula:
Number of elements in the molecule...
```

Figura 99 – Trecho do PENELOPE 2006 solicitando o número de elementos na molécula.

Fonte: PENELOPE (2006).

Em seguida, o usuário deve definir se informará o composto com a fórmula estequiométrica (opção 1) ou se informará a fração por peso de cada elemento (opção 2), conforme a Figura 100.

```
Select one option (1 or 2):
1: Enter chemical (stoichiometric) formula
2: Enter fraction by weight of each element
```

Figura 100 – Trecho do PENELOPE 2006 para seleção da forma que será definido o composto.

Fonte: PENELOPE (2006).

No presente trabalho, padronizou-se usar apenas a opção 1, sem se aprofundar na opção 2. Assim, ao selecionar a opção 1, deve-se informar a fórmula estequiométrica do composto. Primeiro o número atômico e depois o número de átomos ou moléculas de cada elemento. Continuando com o exemplo do PMMA, o composto pode ser informado na ordem vista na Figura 101, a seguir. No exemplo, informa-se “5 6” para indicar que são 5 (cinco) átomos de Carbono, cujo número atômico é $Z=6$; “1 8” para indicar que são 8 (oito) átomos de Hidrogênio, cujo número atômico é $Z=1$; e “8 2” para indicar que são 2 (dois) átomos de Oxigênio, cujo número atômico é $Z=8$.

```
Stoichiometric indices...

Enter atomic number and number of atoms/molecule of the first element ...
6 5
Element: C (Z= 6), atoms/molecule = 5.00000E+00

Enter atomic number and number of atoms/molecule of the second element ...
1 8
Element: H (Z= 1), atoms/molecule = 8.00000E+00

Enter atomic number and number of atoms/molecule of the third element ...
8 2
Element: O (Z= 8), atoms/molecule = 2.00000E+00
```

Figura 101 – Exemplo informando a fórmula estequiométrica do PMMA no PENELOPE 2006.

Fonte: PENELOPE (2006).

O programa irá calcular a energia de excitação significativa (I) e perguntar se o usuário quer modificá-la (Figura 102). Em todas as simulações manteve-se o valor de I calculado pelo PENELOPE 2006, selecionando-se a opção 2 para negar.

```
The calculated mean excitation energy I is 6.86089E+01 eV
Do you want to change it? (1=yes,2=no)
```

Figura 102 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança da energia de excitação significativa calculada, para o caso do PMMA tomado como exemplo.

Fonte: PENELOPE (2006).

O próximo passo é informar a densidade do material. Na Figura 103, pode-se ver o exemplo da densidade do PMMA, que é 1,19000000, sendo informada no terminal.

```
Enter mass density (g/cm**3) ...
1.19000000
Density = 1.19000E+00 g/cm**3
```

Figura 103 – Exemplo informando a densidade do PMMA no PENELOPE 2006.

Fonte: PENELOPE (2006).

O programa irá estimar a força e a energia do oscilador de plasmon e perguntará se o usuário deseja modificar esses valores. Nesse trecho do programa (Figura 104), também não se entrou em detalhes, apenas mantiveram-se os valores calculados, selecionando-se a opção 2 para negar.

```
Estimated oscillator strength and energy of the plasmon:
Fcb = 2.00000E+01, Wcb = 1.40498E+01 eV
(for insulators, these quantities should be set equal to zero)

Do you wish to change the Fcb and Wcb values? (1=yes,2=no)
(type 2 if you are not sure...)
```

Figura 104 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança dos valores da força e da energia do oscilador de plasmon estimados, para o caso do PMMA tomado como exemplo.

Fonte: PENELOPE (2006).

Dessa maneira, conforme mencionado anteriormente, foram criados os seguintes novos compostos:

- carcinoma, com fórmula molecular $N_1C_{11}H_{28}O_{15}$;
- PMMA, com fórmula molecular $C_5O_2H_8$.

Posteriormente, o programa vai para a Etapa 1.2, descrita no Apêndice A.2.

APÊNDICE A.1.2 – Utilizando átomos ou compostos da biblioteca do *software*

A biblioteca do PENELOPE 2006 é um arquivo chamado “pdcompos.p06”, que mais parece um arquivo em Bloco de Notas que usualmente se utiliza no Sistema Operacional Windows. Este arquivo apresenta alguns dados de átomos e compostos. Os dados estão descritos com seus respectivos números de identificação, seguidos de seus nomes. Logo na linha seguinte, sendo apresentados da esquerda para a direita, o número dos elementos que o constituem, seu valor do número atômico (Z) dividido por seu número de massa (A), sua intensidade de energia (I) em elétron-volts e sua densidade em g/cm^3 . Nas linhas subsequentes há também, da esquerda para a direita, as colunas do número atômico (Z) de cada elemento constituinte do átomo/molécula, sua respectiva fração por peso e seu respectivo índice estequiométrico. O início deste arquivo original do programa pode ser visto na Figura 105. Sua continuação, traz alguns dos compostos utilizados no presente trabalho.

```

7 February, 2005
This file contains composition data and physical parameters for
280 materials, taken from the database of the ESTAR program of
Berger (NISTIR 4999, 1992). The first 99 entries are the elements
Z=1-99, ordered by atomic number Z. Materials 100 to 280 are com-
pounds and mixtures, in alphabetical order. The data for each
material are:

Identification no.      NAME
No. of elements      Z/A      I(eV)      Density (g/cm**3)
Element(Z)           Fraction by weight      Stoichiometric index
Element(Z)           Fraction by weight      Stoichiometric index
...
*****

1  HYDROGEN  (1)                                     1
  1  9.92162E-01  1.92000E+01  8.37480E-05
  1  1.00000E+00  1.00000E+00
2  HELIUM    (2)                                     2
  1  4.99675E-01  4.18000E+01  1.66322E-04
  2  1.00000E+00  1.00000E+00

```

Figura 105 – Arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006.

Fonte: PENELOPE (2006).

Do arquivo “pdcompos.p06”, conforme mencionado anteriormente, foram utilizados os seguintes compostos:

- tecido adiposo (Figura 106), com número de identificação 103;
- ar (Figura 107), com número de identificação 104;
- dimetilformamida (Figura 108), com número de identificação 150;
- etanol (Figura 109), com número de identificação 153;
- glicerol (Figura 110), com número de identificação 174;
- nylon (Figura 111), com número de identificação 210;
- água (Figura 112), com número de identificação 278.

103	ADIPOSE TISSUE (ICRP) (103)				103
13	5.58468E-01	6.32000E+01	9.20000E-01		
1	1.19477E-01	6.34657E-01			
6	6.37240E-01	2.84051E-01			
7	7.97000E-03	3.04645E-03			
8	2.32333E-01	7.77462E-02			
11	5.00000E-04	1.16441E-04			
12	2.00000E-05	4.40562E-06			
15	1.60000E-04	2.76566E-05			
16	7.30000E-04	1.21908E-04			
17	1.19000E-03	1.79707E-04			
19	3.20000E-04	4.38192E-05			
20	2.00000E-05	2.67162E-06			
26	2.00000E-05	1.91735E-06			
30	2.00000E-05	1.63779E-06			

Figura 106 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: tecido adiposo.
Fonte: PENELOPE (2006).

104	AIR, DRY (NEAR SEA LEVEL) (104)			104
4	4.99190E-01	8.57000E+01	1.20479E-03	
6	1.24000E-04	1.50187E-04		
7	7.55267E-01	7.84430E-01		
8	2.31781E-01	2.10748E-01		
18	1.28270E-02	4.67111E-03		

Figura 107 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: ar.
Fonte: PENELOPE (2006).

150	N,N-DIMETHYL FORMAMIDE (150)			150
4	5.47238E-01	6.66000E+01	9.48700E-01	
1	9.65230E-02	7.00000E+00		
6	4.92965E-01	3.00000E+00		
7	1.91625E-01	1.00000E+00		
8	2.18887E-01	1.00000E+00		

Figura 108 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: dimetilformamida.
Fonte: PENELOPE (2006).


```

253 ETHYL ALCOHOL (153) 153
   3 5.64373E-01 6.29000E+01 7.89300E-01
   1 1.31269E-01 6.00000E+00
   6 5.21438E-01 2.00000E+00
   8 3.47294E-01 1.00000E+00

```

Figura 109 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: etanol.
Fonte: PENELOPE (2006).

```

174 GLYCEROL (174) 174
   3 5.42921E-01 7.26000E+01 1.26130E+00
   1 8.75540E-02 8.00000E+00
   6 3.91262E-01 3.00000E+00
   8 5.21185E-01 3.00000E+00

```

Figura 110 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: glicerol.
Fonte: PENELOPE (2006).

```

210 NYLON, TYPE 6 AND TYPE 6/6 (210) 210
   4 5.47901E-01 6.39000E+01 1.14000E+00
   1 9.79760E-02 1.10000E+01
   6 6.36856E-01 6.00000E+00
   7 1.23779E-01 1.00000E+00
   8 1.41389E-01 1.00000E+00

```

Figura 111 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: nylon.
Fonte: PENELOPE (2006).

```

278 WATER, LIQUID (278) 278
   2 5.55087E-01 7.50000E+01 1.00000E+00
   1 1.11894E-01 2.00000E+00
   8 8.88106E-01 1.00000E+00

```

Figura 112 – Material do arquivo pdcompos.p06 do PENELOPE 2006: água.
Fonte: PENELOPE (2006).

Assim, é possível utilizar os átomos ou compostos da própria biblioteca do *software*, conforme explicado anteriormente no início do Apêndice A.1, selecionando-se a opção 2 do questionamento mostrado na Figura 97. O programa, então, irá solicitar o número de identificação do material e, como exemplo, pode-se citar o caso do nylon, que está mostrado na Figura 113.

```

Enter material identification number ...
210

210 NYLON, TYPE 6 AND TYPE 6/6 (210)
Element: H (Z= 1), atoms/molecule = 1.10000E+01
Element: C (Z= 6), atoms/molecule = 6.00000E+00
Element: N (Z= 7), atoms/molecule = 1.00000E+00
Element: O (Z= 8), atoms/molecule = 1.00000E+00

Density = 1.14000E+00 g/cm**3

Number of electrons per molecule = 6.20000E+01
Mean excitation energy = 6.39000E+01 eV

```

Figura 113 – Exemplo informando a molécula de nylon no PENELOPE 2006, a partir de sua biblioteca.
Fonte: PENELOPE (2006).

Dentre outras grandezas físicas, o programa também irá estimar a força e a energia do oscilador de plasmon e perguntará se o usuário deseja modificar esses valores. Da mesma forma apresentada no Apêndice A.1.1, nesse trecho do programa (Figura 114), não se entrou em detalhes, apenas mantiveram-se os valores calculados, selecionando-se a opção 2 para negar.

```
Estimated oscillator strength and energy of the plasmon:
Fcb = 2.40000E+01, Wcb = 1.41692E+01 eV
(for insulators, these quantities should be set equal to zero)

Do you wish to change the Fcb and Wcb values? (1=yes,2=no)
(type 2 if you are not sure...)
```

Figura 114 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá mudança dos valores da força e da energia do oscilador de plasmon estimados, para o caso do nylon tomado como exemplo. Fonte: PENELOPE (2006).

Posteriormente, o programa vai para a Etapa 1.2, descrita no Apêndice A.2.

APÊNDICE A.2 – OPÇÃO DO USO DA FUNÇÃO DE INTERFERÊNCIA MOLECULAR (ETAPA 1.2)

Na Etapa 1.2, o programa irá questionar se o usuário deseja realizar a análise com o uso de Função de Interferência Molecular (da sigla em inglês, “MIF”), conforme a Figura 115.

```
Do you want to take into account the MIF in the coherent scatter model?(1=yes,
2=no)
```

Figura 115 – Trecho do PENELOPE 2006 questionando se haverá uso de Função de Interferência Molecular (MIF) na análise. Fonte: PENELOPE (2006).

Para utilizar a Função de Interferência Molecular nos cálculos, basta selecionar a opção 1, confirmando. Ou, caso haja o interesse de realizar a análise com o uso do Modelo Atômico Independente, basta selecionar a opção 2, negando.

Posteriormente, o programa irá proceder conforme a opção selecionada, de acordo com os Apêndices A.2.1 e A.2.2, a seguir.

APÊNDICE A.2.1 – Utilizando Fator de Interferência Molecular

É possível realizar análise com o uso da Função de Interferência Molecular (MIF), conforme explicado anteriormente no início do Apêndice A.2, selecionando-se a opção 1 do questionamento mostrado na Figura 115.

Nesse caso, deve-se ter preparado um arquivo com a extensão “.dat” com os dados do Fator de Forma do respectivo material, determinados experimentalmente. Esse arquivo deve apresentar a seguinte ordem (o exemplo para o caso do PMMA pode ser visto na Figura 116): a primeira linha é comentário, portanto é ignorada pelo compilador; a segunda linha contém a massa molecular do material; a terceira linha contém o número de linhas que vem a seguir, ou seja, é a quantidade de linhas de dados que serão escritas ao longo desse arquivo; e as demais linhas são os dados do fator de forma propriamente dito, sendo a coluna da esquerda para o valor de x , que é igual a $q/(4\pi)$, onde “ q ” representa o momento transferido, e a coluna da direita para o valor do Fator de Forma.

O nome desse arquivo não pode conter mais que 80 caracteres. Assim, pode-se nomeá-lo como “MIF_PMMA.dat”, por exemplo, e será solicitado pelo programa, conforme a Figura 117.

Em seguida, será solicitado o nome do arquivo de material que está sendo criado (Figura 118). Para facilitar a organização, optou-se por se utilizar o mesmo nome de arquivo, porém agora com a extensão “.mat”. O nome desse arquivo também não pode passar de 80 caracteres. Para o caso do PMMA, pode-se identificá-lo como “MIF_PMMA.mat”, por exemplo. Quando a execução do programa terminar, aparecerá no terminal uma nova (vazia) linha de comando.

As referências estão no arquivo do LibreOfficeCalc: Polletti.ods
 100.12
 48
 0 0.791
 0.1 0.791
 0.2 0.815
 0.3 0.986
 0.4 1.2
 0.5 1.476
 0.6 1.833
 0.7 2.242
 0.8 2.356
 0.9 2.197
 1 1.958
 1.1 1.668
 1.2 1.428
 1.3 1.277
 1.4 1.249
 1.5 1.318
 1.6 1.412
 1.7 1.45
 1.8 1.403
 1.9 1.297
 2 1.182
 2.1 1.11
 2.2 1.131
 2.3 1.141
 2.4 1.102
 2.5 1.025
 2.6 0.945
 2.8 0.833
 3 0.784
 3.2 0.739
 3.4 0.71
 3.6 0.698
 3.8 0.684
 4 0.657
 4.2 0.665
 4.4 0.684
 4.6 0.659
 4.8 0.606
 5 0.536
 5.2 0.514
 5.4 0.492
 5.6 0.471
 5.8 0.459
 6 0.44
 6.5 0.436
 7 0.41
 7.5 0.377
 8 0.32

**Figura 116 – Exemplo de arquivo com os Fatores de Forma do material, no caso, PMMA.
 Fonte: PENELOPE (2006).**

Enter name of the MIF data file (up to 80 characters) ...

Figura 117 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de entrada, com os dados de Fator de Forma do material.

Fonte: PENELOPE (2006).

PENELOPE's material data file is being created.
 Enter path+name for this file (up to 80 characters) ...

Figura 118 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de saída, com extensão “.mat”.

Fonte: PENELOPE (2006).

Seguindo os procedimentos descritos, esse arquivo de saída será salvo na mesma pasta “pendbase” em questão, onde o programa executável foi aberto no terminal.

Assim, conforme mencionado anteriormente, nessa fase foram obtidos os seguintes materiais:

- MIF_adiposo.mat
- MIF_agua.mat
- MIF_ar.mat
- MIF_carcinoma.mat
- MIF_dimetilformamida.mat
- MIF_etanol.mat
- MIF_glicerol.mat
- MIF_nylon.mat
- MIF_PMMA.mat

APÊNDICE A.2.2 – Utilizando Modelo Atômico Independente

É possível realizar análise com o uso do Modelo Atômico Independente (IAA), conforme explicado anteriormente no início do Apêndice A.2, selecionando-se a opção 2 do questionamento mostrado na Figura 115.

Como não é necessário o uso do Fator de Forma, então, apenas será solicitado o nome do arquivo de material que está sendo criado de acordo com a Figura 118, vista anteriormente. Para o caso do nylon, pode-se identificá-lo como “IAA_nylon.mat”, por exemplo. Os procedimentos são análogos aos apresentados nessa figura e, nas condições apresentadas, o arquivo de saída também será salvo na mesma pasta “pendbase” em questão, onde o programa executável foi aberto no terminal.

Assim, conforme mencionado anteriormente, nessa fase foram obtidos os seguintes materiais:

- IAA_adiposo.mat
- IAA_agua.mat
- IAA_ar.mat

- IAA_carcinoma.mat
- IAA_dimetilformamida.mat
- IAA_etanol.mat
- IAA_glicerol.mat
- IAA_nylon.mat (Figura 119)
- IAA_PMMA.mat

```

PENELOPE (v. 2006) Material data file .....
Material: NYLON, TYPE 6 AND TYPE 6/6 (210)
Mass density = 1.14000000E+00 g/cm**3
Number of elements in the molecule = 4
  atomic number = 1, atoms/molecule = 1.10000000E+01
  atomic number = 6, atoms/molecule = 6.00000000E+00
  atomic number = 7, atoms/molecule = 1.00000000E+00
  atomic number = 8, atoms/molecule = 1.00000000E+00
Mean excitation energy = 6.39000000E+01 eV
Number of oscillators = 7 (E/P inelastic model)
  1 2.40000000E+01 0.00000000E+00 1.41692361E+01 0 30
  2 1.80000000E+01 1.40000000E+01 4.29699588E+01 0 3
  3 2.00000000E+00 1.50000000E+01 4.56431743E+01 7 2
  4 2.00000000E+00 2.40000000E+01 7.29098522E+01 8 2
  5 1.20000000E+01 2.85000000E+02 8.64934387E+02 6 30
  6 2.00000000E+00 4.10000000E+02 1.24424040E+03 7 1
  7 2.00000000E+00 5.43000000E+02 1.64785730E+03 8 1
Number of shells = 6 (Compton IA model)
  1 2.40000000E+01 0.00000000E+00 9.38339283E-01 0 30
  2 2.00000000E+01 1.41000000E+01 6.65200000E-01 0 30
  3 2.00000000E+00 2.40000000E+01 5.79000000E-01 8 2
  4 1.20000000E+01 2.85000000E+02 1.53000000E-01 6 30
  5 2.00000000E+00 4.10000000E+02 1.30000000E-01 7 1
  6 2.00000000E+00 5.43000000E+02 1.13000000E-01 8 1
*** RELAX: Z = 1, NO. OF SHELLS = 1, NO. OF TRANSITIONS = 0
  1 1s1/2 1 1.40000000E+01
*** RELAX: Z = 6, NO. OF SHELLS = 3, NO. OF TRANSITIONS = 8
  1 1s1/2 2 2.85000000E+02
  2 2s1/2 2 1.10000000E+01
  3 2p1/2 2 1.10000000E+01
  1 3 0 5.61488000E-04 2.82020000E+02
  1 4 0 1.12060000E-03 2.82030000E+02
  1 2 2 4.13609000E-01 2.55890000E+02
  1 2 3 1.36190000E-01 2.64460000E+02
  1 2 4 2.71099000E-01 2.64470000E+02
  1 3 3 4.20748000E-03 2.73030000E+02
  1 3 4 1.10012000E-01 2.73040000E+02
  1 4 4 6.32008000E-02 2.73050000E+02
*** RELAX: Z = 7, NO. OF SHELLS = 4, NO. OF TRANSITIONS = 8
  1 1s1/2 2 4.10000000E+02
  2 2s1/2 2 1.50000000E+01
  3 2p1/2 2 1.40000000E+01
  4 2p3/2 1 1.40000000E+01
  1 3 0 1.09420000E-03 3.93350000E+02
  1 4 0 2.18181000E-03 3.93370000E+02
  1 2 2 2.65388000E-01 3.58650000E+02
  1 2 3 1.29999000E-01 3.70250000E+02
  1 2 4 2.58276000E-01 3.70270000E+02
  1 3 3 8.15943000E-03 3.81850000E+02
  1 3 4 2.12711000E-01 3.81870000E+02
  1 4 4 1.22190000E-01 3.81890000E+02
*** RELAX: Z = 8, NO. OF SHELLS = 4, NO. OF TRANSITIONS = 8
  1 1s1/2 2 5.43000000E+02

```

Figura 119 – Exemplo de arquivo de material com extensão .mat, no caso, nylon com Modelo Atômico Independente (IAA).

Fonte: PENELOPE (2006).

APÊNDICE A.3 – CONVERSÃO DA EXTENSÃO DO ARQUIVO DE MATERIAL (ETAPA 1.3)

Depois de cumprir a Etapa 1.2, é preciso converter a extensão “.mat” para a extensão “.mcgpu”, com o auxílio do programa chamado “MC-GPU-create-material-data.x” (Figura 120), que é outro arquivo executável que se encontra na pasta “pendbase” do PENELOPE 2006. Para isso, executa-se o comando “./MC-GPU-create-material-data.x”, sem as aspas.



Figura 120 – Ícone do programa “MC-GPU-create-material-data.x”.
Fonte: PENELOPE (2006).

Este programa irá solicitar do usuário os limites de energia máximo (E_{max}) e mínimo (E_{min}), conforme a Figura 121. Os valores utilizados no presente trabalho foram 5000 e 125000, respectivamente.

```
-- Enter the energy range to tabulate: Emin, Emax (eg, 5000 125000):
```

Figura 121 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição dos limites de energia a ser utilizados.
Fonte: PENELOPE (2006).

Logo em seguida, é a vez de informar o número de compartimentos de energia, conforme a Figura 122, que por motivos funcionais do programa é 23002.

```
-- Enter the number of energy bins (eg, 8192):
```

Figura 122 – Trecho do PENELOPE 2006 para definição do número de compartimentos de energia.
Fonte: PENELOPE (2006).

Também deve-se informar o nome do arquivo de material, criado na Etapa 1.2, cuja extensão é “.mat” (Figura 123) e informar o nome do arquivo de material a ser criado, que pode possuir o mesmo nome, porém com extensão “.mcgpu”

(Figura 124). Por exemplo, pode-se escrever “MIF_nylon.mat” e depois “MIF_nylon.mcgpu”, respectivamente.

```
-- Enter the name of the PENELOPE 2006 material data file (eg, water.mat):
```

Figura 123 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de entrada, com extensão “.mat”.

Fonte: PENELOPE (2006).

```
-- Enter the name of the output data file for MC-GPU (eg, water.mcgpu)..
```

Figura 124 – Trecho do PENELOPE 2006 para identificação do arquivo de saída, com extensão “.mcgpu”.

Fonte: PENELOPE (2006).

Se todos os procedimentos forem realizados corretamente, aparecerá uma mensagem de sucesso no terminal, conforme a Figura 125.

```
*** Material file correctly generated. Have a nice simulation!
```

Figura 125 – Mensagem de sucesso na geração do arquivo de material.

Fonte: PENELOPE (2006).

Assim, conforme mencionado anteriormente, nesta fase foram obtidos os seguintes materiais:

- MIF_adiposo.mcgpu
- MIF_agua.mcgpu
- MIF_ar.mcgpu
- MIF_carcinoma.mcgpu
- MIF_dimetilformamida.mcgpu
- MIF_etanol.mcgpu
- MIF_glicerol.mcgpu
- MIF_nylon.mcgpu
- MIF_PMMA.mcgpu
- IAA_adiposo.mcgpu
- IAA_agua.mcgpu
- IAA_ar.mcgpu
- IAA_carcinoma.mcgpu
- IAA_dimetilformamida.mcgpu
- IAA_etanol.mcgpu
- IAA_glicerol.mcgpu
- IAA_nylon.mcgpu (Figura 126)
- IAA_PMMA.mcgpu


```

#[MATERIAL DEFINITION FOR MC-GPU: interaction mean free path and sampling data from PENELOPE 2006]
#[MATERIAL NAME]
# NYLON, TYPE 6 AND TYPE 6/6 (210)
#[NOMINAL DENSITY (g/cm^3)]
# 1.14000000
#[NUMBER OF DATA VALUES]
# 23002
#[MEAN FREE PATHS (cm) (ie, average distance between interactions)]
#[Energy (eV) | Rayleigh | Compton | Photoelectric | TOTAL (+pair prod) (cm) | Rayleigh: max cumul prob F^2]
5.0000000000E+03 2.2805742664E+00 6.4596414473E+00 3.9231521622E-02 3.8339147186E-02 3.3763997970E-01
5.0052169377E+03 2.2832971280E+00 6.4573088034E+00 3.9358204522E-02 3.8460814352E-02 3.3790141818E-01
5.0104338753E+03 2.2860203989E+00 6.4549794306E+00 3.9485163793E-02 3.8582734679E-02 3.3816265307E-01
5.0156508130E+03 2.2887440787E+00 6.4526533208E+00 3.9612399751E-02 3.8704908390E-02 3.3842368507E-01
5.0208677506E+03 2.2914681671E+00 6.4503304662E+00 3.9739912709E-02 3.8827335739E-02 3.3868451493E-01
5.0260846883E+03 2.2941926637E+00 6.4480108588E+00 3.9867702980E-02 3.8950016929E-02 3.3894514335E-01
5.0313016259E+03 2.2969175681E+00 6.4456944907E+00 3.9995770880E-02 3.9072952197E-02 3.3920557103E-01
5.0365185636E+03 2.2996428799E+00 6.4433813540E+00 4.0124116722E-02 3.9196141772E-02 3.3946579866E-01
5.0417355013E+03 2.3023685989E+00 6.4410714409E+00 4.0252740820E-02 3.9319585882E-02 3.3972582694E-01
5.0469524389E+03 2.3050947246E+00 6.4387647436E+00 4.0381643488E-02 3.9443284755E-02 3.3998565657E-01
5.0521693766E+03 2.3078212568E+00 6.4364612542E+00 4.0510825041E-02 3.9567238620E-02 3.4024528822E-01
5.0573863142E+03 2.3105481949E+00 6.4341609650E+00 4.0640285792E-02 3.9691447704E-02 3.4050472259E-01
5.0626032519E+03 2.3132755387E+00 6.4318638682E+00 4.0770026056E-02 3.9815912235E-02 3.4076396037E-01
5.0678201895E+03 2.3160032878E+00 6.4295699562E+00 4.0900046147E-02 3.9940632439E-02 3.4102300223E-01
5.0730371272E+03 2.3187314419E+00 6.4272792212E+00 4.1030346379E-02 4.0065608545E-02 3.4128184887E-01
5.0782540649E+03 2.3214600005E+00 6.4249916557E+00 4.1160927067E-02 4.0190840778E-02 3.4154050095E-01
5.0834710026E+03 2.3241880000E+00 6.4227000000E+00 4.1290000000E-02 4.0310000000E-02 3.4179900000E-01

```

Figura 126 – Exemplo de arquivo de material com extensão .mcgpu, no caso, nylon com Modelo Atômico Independente (IAA).

Fonte: PENELOPE (2006).

É interessante ressaltar que não é preciso recriar os arquivos de materiais para cada uma das combinações, pois estes podem ser reutilizados de acordo com cada combinação.

APÊNDICE B – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MC-GPU (ETAPA 2)

Deve-se ter os seguintes arquivos numa única pasta, ainda no Sistema Operacional Linux, conforme mencionado anteriormente (Figura 127):

- o arquivo de energia com extensão “.spc”, que, no caso, descreve um feixe monoenergético de 8,54keV;
- o arquivo com extensão .in, com os parâmetros de entrada;
- o arquivo de geometria em sua versão compactada;
- os arquivos compactados dos materiais a serem simulados.

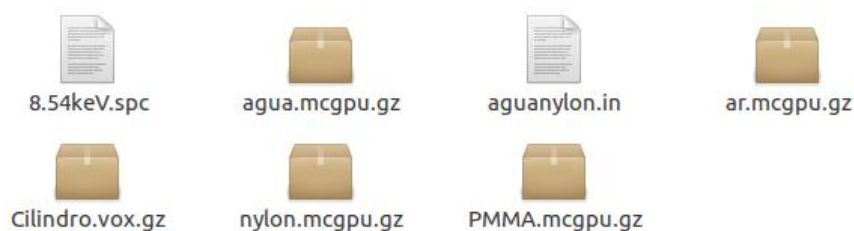


Figura 127 – Arquivos de entrada para o software MC-GPU.

Fonte: MC-GPU (2012).

Fora dessa pasta, ou seja, numa pasta anterior (Figura 128), deve-se ter o arquivo executável que realiza as simulações, “MC-GPU_v1.3_CPU.x”, cujo ícone pode ser visto em destaque na figura. Nessa pasta anterior, por motivos de organização, pode-se criar pastas para cada combinação e armazenar dentro de cada pasta os resultados obtidos respectivamente. No caso da combinação de água e nylon, por exemplo, optou-se por alocar os arquivos mostrados na Figura 127, dentro da pasta “aguanylon” da Figura 128.



Figura 128 – Organização das pastas das combinações analisadas. Destaque para o ícone do programa “MC-GPU_v1.3_CPU.x” e para a pasta “GNUPLOT_SCRIPTS_VISUALIZATION”.

Fonte: MC-GPU (2012).

A pasta “GNU PLOT_SCRIPTS_VISUALIZATION”, também em destaque na Figura 128, contém um arquivo chamado “gnuplot_images_MC-GPU.gpl” (Figura 129), que possui a programação que gera as imagens propriamente ditas. Basta saber que esse arquivo precisa estar alocado dessa maneira para que as imagens sejam geradas. Porém, por motivos elucidativos, esse arquivo pode ser visualizado em anexo (ANEXO C).

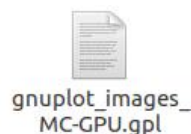


Figura 129 – Ícone do programa “gnuplot_images_MC-GPU.gpl”.

Fonte: MC-GPU (2012).

Para utilizar o MC-GPU, portanto, deve-se executar primeiramente o arquivo “MC-GPU_v1.3_CPU.x”, com o auxílio do comando “`../MC_GPU_v1.3_CPU.x aguanylon.in | tee aguanylon.out`”, sem as aspas, abrindo o terminal na pasta da combinação que se deseja simular. As partes sublinhadas irão variar de acordo com as simulações em análise, mas representam o arquivo de entrada com extensão “.in”, que deve estar na pasta conforme a Figura 127, e o nome que receberá o arquivo de saída do MC-GPU, com extensão “.out”.

O programa irá mostrar algumas informações na tela logo que iniciar a simulação, porém, no decorrer do processo não é possível saber como a simulação está procedendo. Apenas ao final da simulação é possível saber se ela foi bem-sucedida.

Se realizado com sucesso (Etapa 2.1), aparecem três arquivos na pasta da Figura 127, com as seguintes extensões: “.dat”, “.raw” e “.out” (Figura 130). O arquivo “.out” (exemplo em ANEXO D para o caso da combinação com MIF de água e nylon nos cilindros internos do *phantom 2*, com a fonte em $y=0,3$) informa se tudo ocorreu com sucesso, assim como também aparece na tela do terminal, e descreve alguns dados, como tempo de simulação, por exemplo. Já o arquivo “.dat” é onde estão os dados em valores numéricos do espalhamento elástico (Rayleigh), além de outros espalhamentos, que não são foco do presente trabalho. Esse arquivo “.dat” é o arquivo necessário para geração das

imagens do padrão de espalhamento. O arquivo “.raw” não é necessário ao presente estudo.

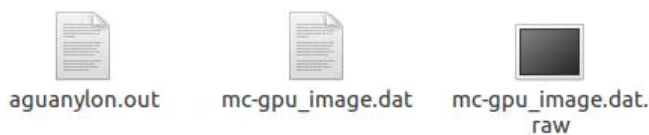


Figura 130 – Arquivos de saída do software MC-GPU.

Fonte: MC-GPU (2012).

Para gerar as imagens dos padrões de espalhamento (Etapa 2.2) move-se o arquivo com extensão “.dat” para a sua pasta anterior, que é a pasta da Figura 128. Posteriormente, executa-se o comando “gnuplot ../GNUPLOT_SCRIPTS_VISUALIZATION/gnuplot_images_MC-GPU.gpl”, sem as aspas. Se os procedimentos forem executados corretamente, aparece escrito “Done!” no terminal e aparecem mais seis arquivos com extensão “.png” para a combinação em análise (Etapa 2.3) na pasta onde o terminal foi aberto (Figura 131).

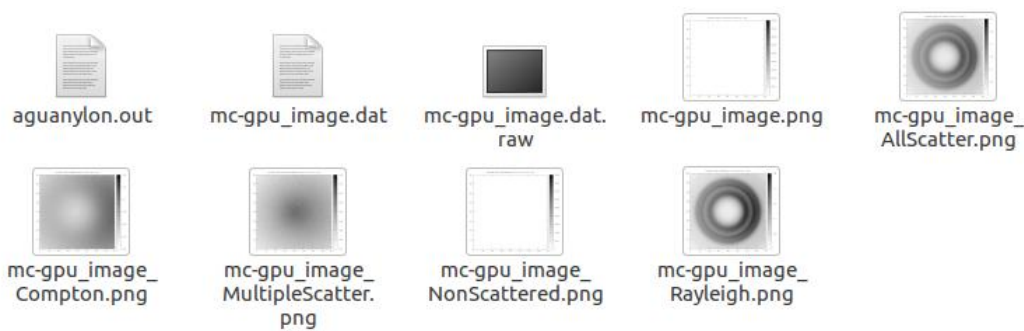


Figura 131 – Arquivos finais de saída do software MC-GPU.

Fonte: MC-GPU (2012).

O presente trabalho tem foco apenas na imagem produzida por efeito Rayleigh, ou seja, no arquivo “mc-gpu_image_Rayleigh.png”. Porém, os outros dados também ficam armazenados no arquivo de saída com extensão “.dat”, conforme explicado anteriormente.

Quando com o *phantom* 1, tais procedimentos foram repetidos para cada uma das combinações em $y = 0,1$ mm, para cada uma em $y = 0,2$ mm e para cada uma em $y = 0,3$ mm, devido a posição dos materiais, conforme explicado anteriormente na Figura 22. Os arquivos de saída gerados com extensão “.dat” foram:

- MIF_adiposo.dat
- MIF_agua.dat
- MIF_carcinoma.dat
- MIF_dimetilformamida.dat
- MIF_etanol.dat
- MIF_glicerol.dat
- MIF_nylon.dat
- IAA_adiposo.dat
- IAA_agua.dat
- IAA_carcinoma.dat
- IAA_dimetilformamida.dat
- IAA_etanol.dat
- IAA_glicerol.dat
- IAA_nylon.dat

Quando com o *phantom 2*, os mesmos procedimentos foram repetidos para cada uma das combinações em $y = 0,1$ mm, para cada uma em $y = 0,2$ mm e para cada uma em $y = 0,3$ mm, devido a posição dos materiais, conforme explicado anteriormente na Figura 23. Também foram repetidos para cada uma das combinações com a fonte girada em 90° no sentido para cima e no sentido para baixo, conforme explicado anteriormente na Figura 24. Os arquivos de saída gerados com extensão “.dat”, para cada posição da fonte, foram:

- MIF_adiposocarcinoma.dat
- MIF_aguanylon.dat
- MIF_dimetilformamidaglicerol.dat
- MIF_etanolglicerol.dat
- IAA_adiposocarcinoma.dat
- IAA_aguanylon.dat
- IAA_dimetilformamidaglicerol.dat
- IAA_etanolglicerol.dat

Feito esses procedimentos, cada arquivo “.dat” então seguiu para a Etapa 3, descrita no Apêndice C. Vale ressaltar que cada um desses arquivos com extensão “.dat” possuíam seus respectivos arquivos chamados “mc-gpu_image_Rayleigh.png”.

APÊNDICE C – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE MATLAB® (ETAPA 3)

É interessante destacar que a partir desta etapa em diante todos os procedimentos foram realizados no Sistema Operacional Windows. Então, cada arquivo com extensão “.dat” foi aberto no MATLAB®, conforme a Figura 132, na qual os valores são apenas para exemplo. Nessa figura é possível ver três destaques. Da esquerda para a direita, é importante saber que foi preciso delimitar os valores os quais se desejava analisar em “Range”, deixando-o em C19:C160018, para selecionar apenas os valores obtidos dos espalhamentos Rayleigh. Em “Output Type” foi selecionada a opção “Column vectors” para criar uma coluna com valores (vetor de entrada). E, por fim, clicar em “Import Selection”, para finalmente alocar essas variáveis no “Workspace” do MATLAB, conforme a Figura 133.

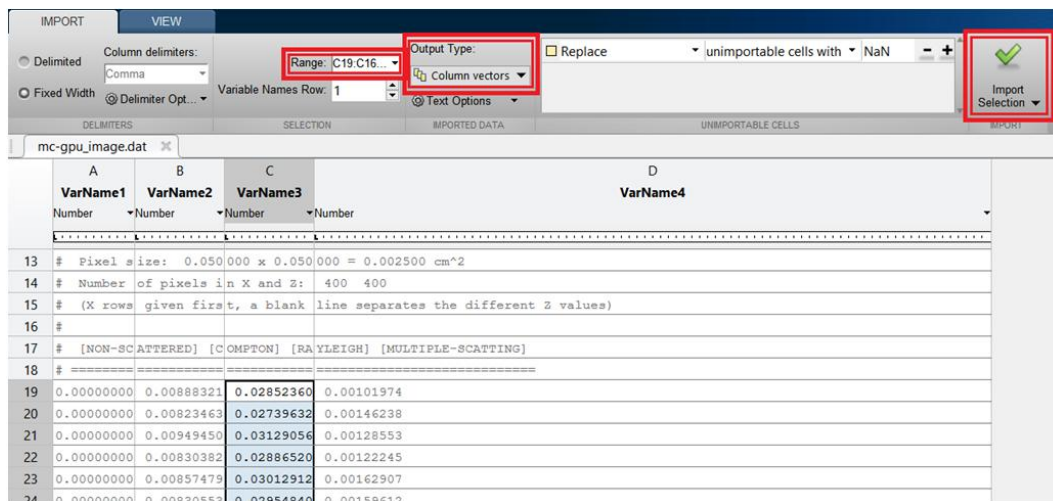


Figura 132 – Arquivo “mc-gpu_image.dat” aberto no software MATLAB R2017b.

Fonte: Autoria própria.

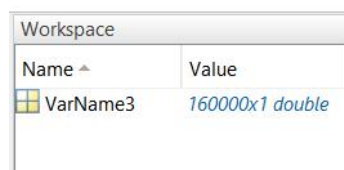


Figura 133 – Workspace do MATLAB R2017b.

Fonte: Autoria própria.

Em seguida, foi escrito o código apresentado na Figura 134, convertendo os dados do vetor de entrada do “Workspace” para uma imagem “.tiff” em 8 bits, não

comprimida. No exemplo da figura o nome do arquivo de saída foi “MIF_nylon.tiff” por se tratar da análise da combinação principal de nylon (*phantom 1*), com MIF (Função de Interferência Molecular). Desta maneira, o nome da imagem foi sendo alterado conforme os materiais de cada combinação.

```
plotscript.m x +
1- plotdata = vec2mat(VarName3,400);%transforma o vetor de entrada em matriz
2-
3- plotdata = im2uint8(plotdata); %converte para 8 bits
4-
5- imwrite(plotdata,'MIF_nylon.tiff','Compression','none')%salva a imagem em tiff, 8 bits, não comprimida
6-
7- whos plotdata
8-
```

Figura 134 - Código para conversão dos dados para um arquivo com extensão “.tiff”, de imagem em 8 bits, não comprimida.

Fonte: LIERX, 2017.

Depois, foi rodado o respectivo código e, com isso, criou-se um arquivo de saída com a extensão “.tiff”, na mesma pasta onde o código foi salvo. Tal arquivo, para o caso do nylon com Função de Interferência Molecular, por exemplo, pode ser visto na Figura 135. A imagem de saída, portanto, é referente ao padrão de espalhamento Rayleigh.



Figura 135 – Arquivo com extensão “.tiff”, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Todos esses procedimentos deste Apêndice C foram realizados para cada um dos arquivos com extensão “.dat” obtidos na etapa anterior (Etapa 2).

Cada arquivo “.tiff” seguiu para a Etapa 4, descrita no Apêndice D.

APÊNDICE D – PROCEDIMENTOS REALIZADOS NO SOFTWARE fit2d (ETAPA 4)

Na tela inicial do *software* fit2d (Figura 136), deve-se clicar na opção “I ACCEPT”, para aceitar as condições do *software* e, então, poder utilizá-lo.



Figura 136 – Tela inicial do *software* fit2d.

Fonte: Autoria própria.

Todos os botões de ajuste do programa são amarelos. E com os botões de cada especificação deve-se configurá-lo adequadamente.

A tela seguinte – “*Dimentions of Program Arrays*” (que traduzindo do inglês para o português significa Dimensões das Matrizes do Programa) – foi configurada conforme a Figura 137, indicando que a imagem será formada por uma matriz de 400 por 400 unidades (pixels). Em seguida, ao clicar em “O.K.”, em destaque na figura, o programa muda de tela.

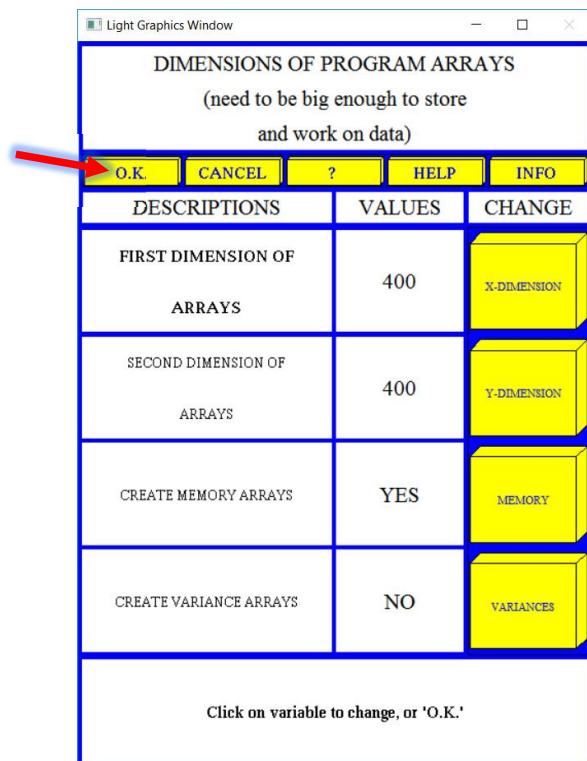


Figura 137 – Tela do *software* fit2d ao aceitar suas condições de uso.

Fonte: Autoria própria.

O programa apresenta, então, a tela de interfaces científicas (“*SCIENTIFIC INTERFACE*”) do fit2d, que pode ser visualizada na Figura 138, sendo utilizada três vezes em cada integração de imagem para se obter o perfil de espalhamento de cada simulação analisada.

Na primeira vez, na tela de interfaces científicas (Figura 138), selecionou-se a opção “2-D FITTING”, para selecionar a interface científica em duas dimensões (“2-D”) e, então, definir o arquivo de entrada na tela seguinte, clicando-se no botão “INPUT” para indicar o arquivo “.tiff” a ser integrado pelo *software*, conforme destaque na Figura 139. Esse arquivo “.tiff” é o arquivo criado na etapa anterior (Etapa 3).



Figura 138 – Trecho da tela de interfaces científicas do *software* fit2d. Destaque para os botões utilizados nessa mesma tela em alguns procedimentos no decorrer do processo.
Fonte: Autoria própria.

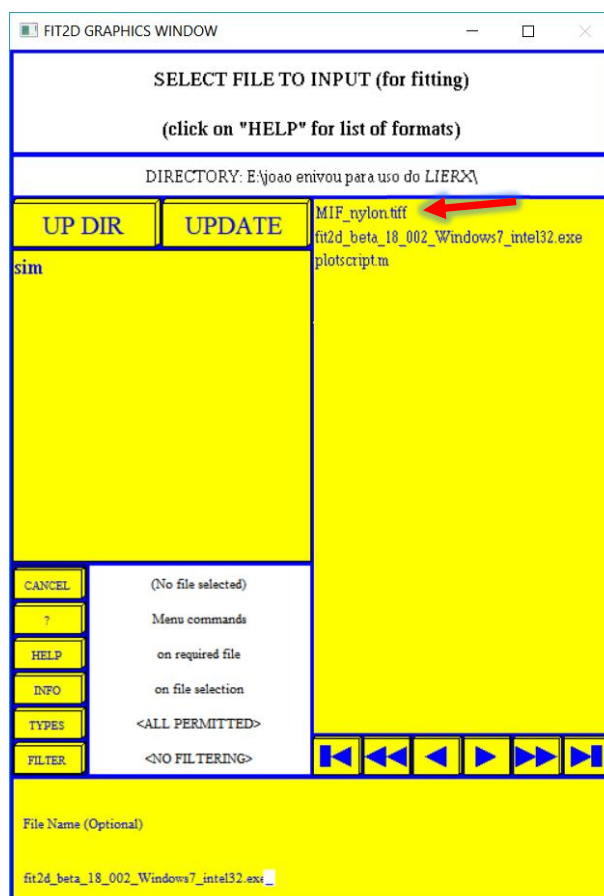


Figura 139 – Tela para seleção do arquivo a ser integrado pelo *software* fit2d, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.
Fonte: Autoria própria.

A imagem do padrão de espalhamento Rayleigh foi aberta na tela (Figura 140) e, em seguida, clicou-se em “EXIT”.

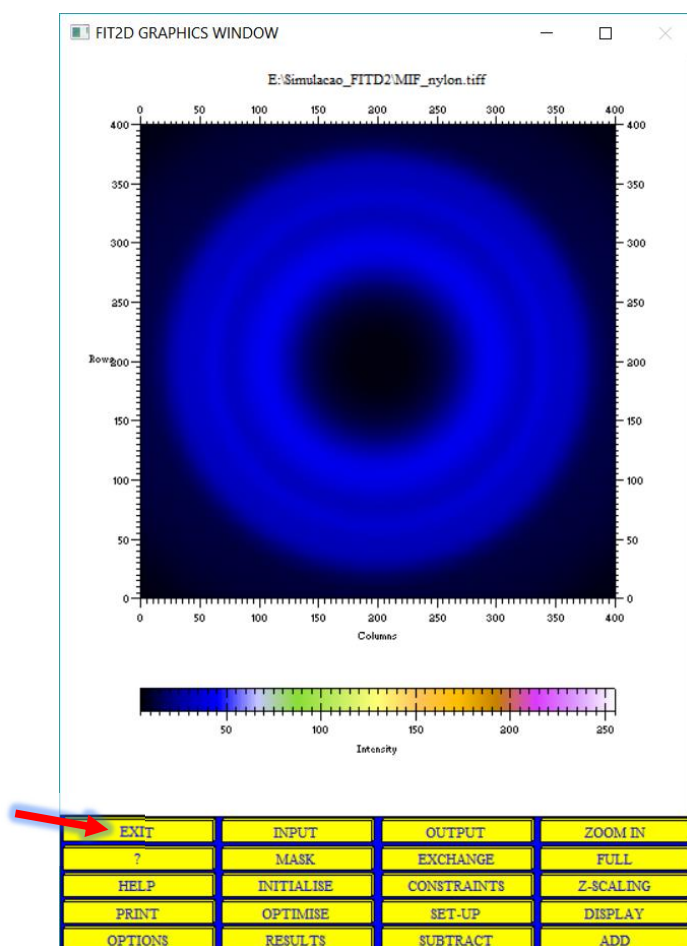


Figura 140 – Tela com o arquivo de entrada (“INPUT”) para o *software* fit2d, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Isso foi feito para voltar à mesma tela da Figura 138, vista anteriormente, e nela selecionou-se a opção “SET-UP”, para configurar as especificações da análise simulada.

Na tela do “FIT2D SET-UP”, que armazena as especificações da análise, selecionou-se a opção “GEOMETRY” e, em seguida, “ELLIPSE COORDINATES” para localizar o centro do feixe de fótons, que o *software* chama de “BEAM CENTRE”. Para isso, marcaram-se 8 (oito) pontos, conforme destaques na Figura 141, demarcando o contorno do padrão de espalhamento. O fit2d localiza o centro dos anéis a partir desses pontos.

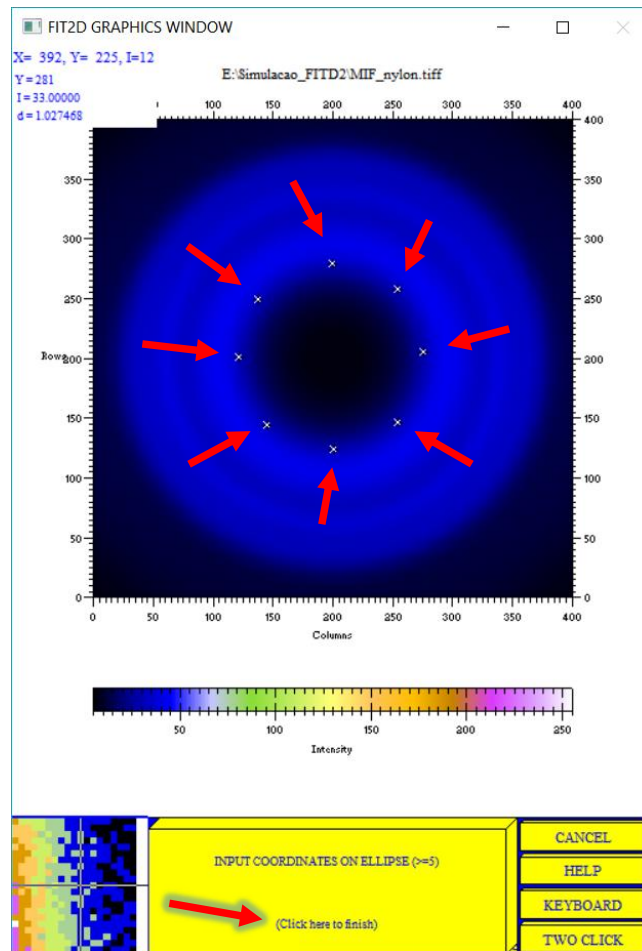


Figura 141 – Marcação do padrão de espalhamento para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF, no *software fit2d*.

Fonte: Autoria própria.

Para finalizar, clicou-se no botão onde está escrito “(Click here to finish)” e, em seguida, foram preenchidas as informações conforme a Figura 142.

O tamanho dos pixels no eixo x e no eixo y é de 500 por 500 μm , pois a imagem de saída é de 20 por 20 cm, formada com 400 por 400 pixels, conforme descrito anteriormente, de acordo com a equação a seguir:

$$\frac{20 \text{ cm}}{400 \text{ pixels}} = \frac{0,2 \text{ m}}{400 \text{ pixels}} = \frac{500 \mu\text{m}}{1 \text{ pixel}} = 500\mu\text{m}/\text{pixel}$$

A distância entre amostra e detector é de 205 mm em todos os casos analisados, conforme a Figura 22 e a Figura 23.

E o comprimento de onda é de 1,4518 \AA , de acordo com a equação para cálculo da energia do fóton.

FIT2D GRAPHICS WINDOW

EXPERIMENTAL GEOMETRY

CONTROL FORM

O.K. CANCEL ? HELP INFO

DESCRIPTIONS	VALUES	CHANGE
SIZE OF HORIZONTAL PIXELS (MICRONS)	500.0000	X-PIXEL SIZE
SIZE OF VERTICAL PIXELS (MICRONS)	500.0000	Y-PIXEL SIZE
SAMPLE TO DETECTOR DISTANCE (MM)	205.0000	DISTANCE
WAVELENGTH (ANGSTROMS)	1.451800	WAVELENGTH
X-PIXEL COORDINATE OF DIRECT BEAM	40516.84	X-BEAM CENTRE
Y-PIXEL COORDINATE OF DIRECT BEAM	196.2855	Y-BEAM CENTRE
ROTATION ANGLE OF TILTING PLANE (DEGREES)	0.0	TIPT ROTATION
ANGLE OF DETECTOR TILT IN PLANE (DEGREES)	0.0	ANGLE OF TILT
ROTATION ANGLE OF DETECTOR X-AXIS FROM HORIZONTAL (DEGREES)	0.0	DETECTOR ROTATION

Click on variable to change, or 'O.K.'

Figura 142 – Tela com o arquivo de entrada (“INPUT”) para o software fit2d. Destaque para as opções que foram especificadas.

Fonte: Autoria própria.

Especificado esses valores, clicou-se em OK e, depois, em EXIT. Assim, o programa volta para a tela da Figura 138, na qual selecionou-se a opção “SAXS/GISAXS”, aparecendo a tela da Figura 143.

Nessa tela, clicou-se em “CAKE”, depois em “ELLIPSE COORDINATES” e marcaram-se novamente oito pontos para a localização do centro do padrão de espalhamento, semelhantemente ao que foi apresentado na Figura 141. Posteriormente, clicou-se em “(Click here to finish)”, aparecendo a marcação automática do centro dos anéis, com um “X” maior que todos os demais, indicando o local. Feito isso, marcaram-se mais quatro pontos, de acordo com a ordem numerada na Figura 144. Os pontos 1 e 2 servem para marcar os limites angulares do setor circular, e devem ser marcados no sentido anti-horário. Os pontos 3 e 4 são as marcações da parte mais interna e mais externa dos anéis a ser integrada para análise, respectivamente. Para as posições da fonte em $y = 0,1$ mm ou em $y = 0,2$ mm

ou quando direcionada para cima ou para baixo, utilizou-se o setor circular à esquerda. Caso contrário, à direita.

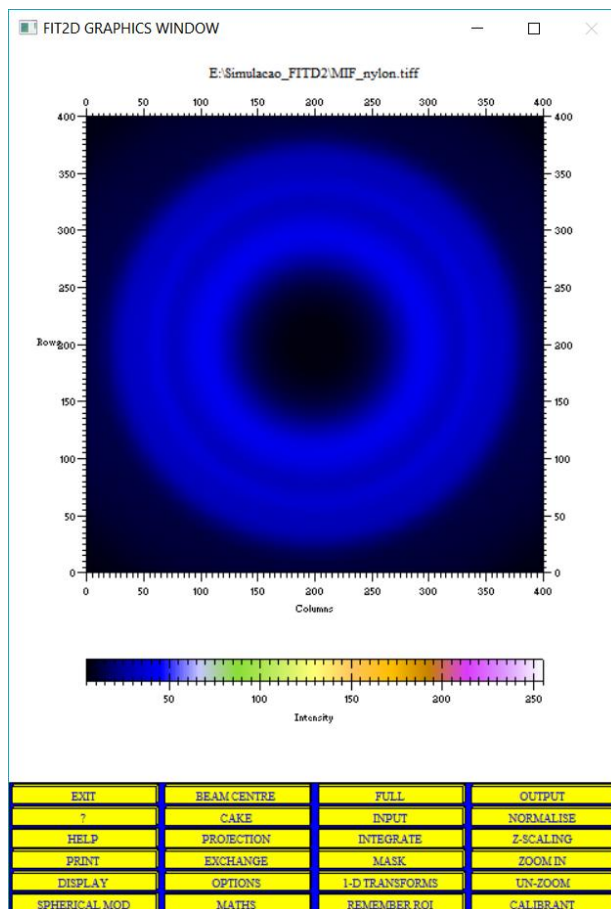


Figura 143 – Tela do *software* fit2d para configurar a integração do padrão de espalhamento, no caso, *phantom 1* na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Na tela da Figura 144, clicou-se em “INTEGRATE”, para integrar os dados. Os dados que apareceram na nova tela foram conferidos, para garantir que os valores em destaque nessa tela não fossem modificados ao longo do processo. Os valores deveriam ser os mesmos valores apresentados em destaque na Figura 142.

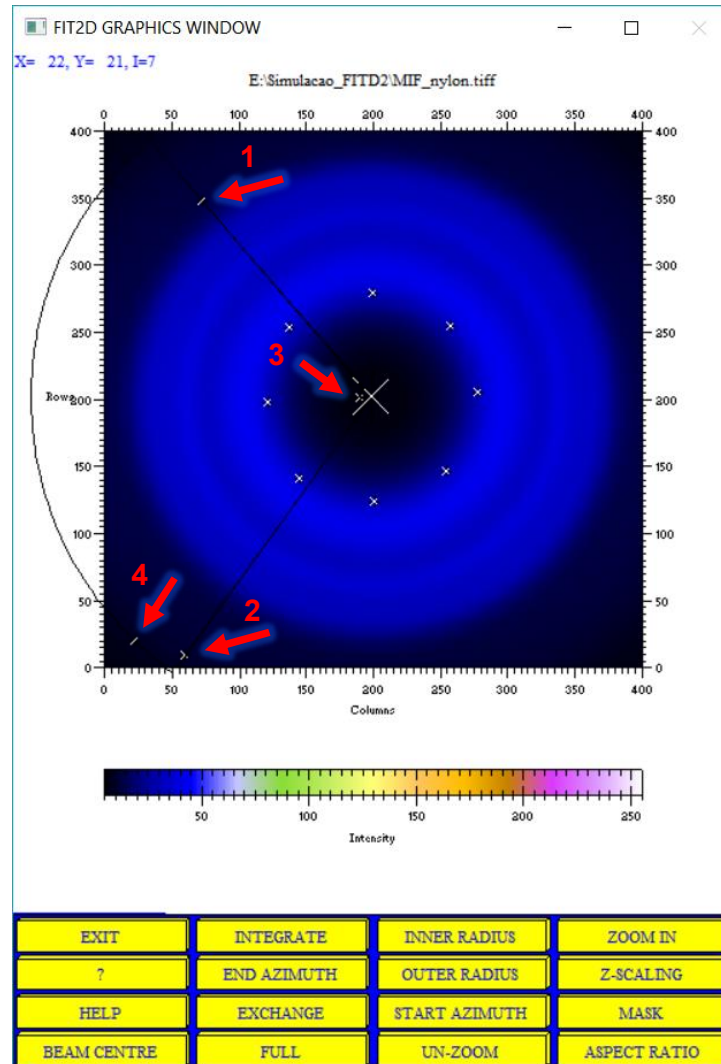


Figura 144 – Tela para identificação de todos os pontos a serem marcados na imagem do padrão de espalhamento no *software* fit2d, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Ao clicar em “O.K.” surgiu a tela da Figura 145, para definir o “SCAN TYPE” em “Q-SPACE” e o “AZIMUTH BINS” em “1”. Em seguida, clicou-se em “O.K.”, novamente, agora para finalizar toda a configuração e prosseguir para a integração propriamente dita.

FIT2D GRAPHICS WINDOW

TYPE OF AZIMUTH/RADIAL OR
2-THETA TRANSFORMATION

O.K. CANCEL ? HELP INFO

DESCRIPTIONS	VALUES	CHANGE
STARTING AZIMUTH ANGLE (DEGREES)	130.8293	START AZIMUTH
END AZIMUTH ANGLE (DEGREES)	-125.9518	END AZIMUTH
INNER RADIAL LIMIT (PIXELS)	8.663289	INNER RADIUS
OUTER RADIAL LIMIT (PIXELS)	253.4822	OUTER RADIUS
SCAN TYPE (RADIAL, 2-THETA, Q-SPACE)	Q-SPACE	SCAN TYPE
DEFAULT TO APPROX. 1 DEGREE SIZE AZIMUTHAL BINS	NO	1 DEGREE AZ
NUMBER OF AZIMUTHAL BINS	1	AZIMUTH BINS
NUMBER OF RADIAL/2-THETA BINS	245	RADIAL BINS
INTENSITY CONSERVATION	NO	CONSERVE INT.
APPLY POLARISATION CORRECTION	YES	POLARISATION
POLARISATION FACTOR	0.990000	FACTOR
MAXIMUM FOR D-SPACINGS SCANS (ANGSTROMS)	20.00000	MAX. D-SPACING
GEOMETRICAL CORRECTION TO INTENSITIES	YES	GEOMETRY COR.
CORRECT PARALLAX EFFECT ON ANGULAR POSITION	NO	CORRECT PARALLAX

Click on variable to change, or 'O.K.'

Figura 145 – Tela para definição do tipo de varredura e do feixe na direção azimutal no software fit2d.

Fonte: Autoria própria.

Após todos esses procedimentos, finalmente foi calculado e apresentado o perfil de espalhamento em análise (Figura 146).

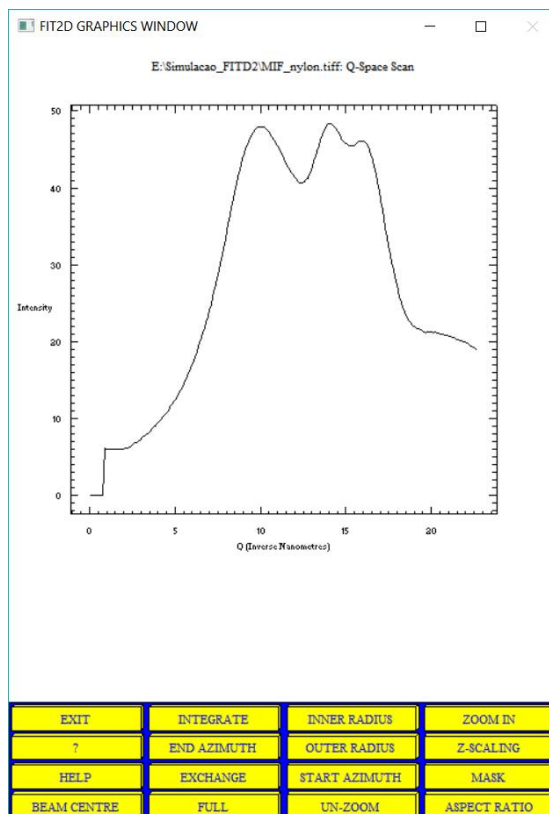


Figura 146 – Perfil de espalhamento no *software* fit2d, para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Para armazenar os resultados, clicou-se em “EXIT” e, depois, em “OUTPUT”, surgindo o trecho da tela que pode ser visto na Figura 147. Em destaque, na figura, encontram-se os dois principais formatos que foram salvos os arquivos de saída.



Figura 147 – Trecho da tela do *software* fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração.

Fonte: Autoria própria.

No primeiro caso, ao clicar em “FIT2D FORMAT”, aparecerá o trecho da tela apresentado na Figura 148, bastando-se clicar em “YES”, para armazenar o

arquivo saída com a extensão “.f2d” na mesma pasta onde se localiza o *software* do fit2d.



Figura 148 – Trecho da tela do *software* fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração com formato “.f2d”.

Fonte: Autoria própria.

No segundo caso, ao clicar em “MULTI-CHIPLLOT”, aparecerá a tela apresentada na Figura 149, bastando-se mudar a extensão do arquivo, em “EXTENSION”, para “.dat” e clicar em “O.K.”, para armazenar, assim, o arquivo de saída com essa extensão na mesma pasta onde se localiza o *software* do fit2d. O mesmo foi feito para a extensão “.chi”, que também armazena os dados de saída.

Além disso, capturou-se a imagem gráfica do perfil de espalhamento com a função de “Print Screen” do teclado, salvando-a com a extensão “.png”.

Para fechar o *software* do fit2d, clicou-se em “EXIT”, para aparecer a mesma tela que pode ser vista na Figura 138. Então, clicou-se em “EXIT FIT2D” e confirmou-se a finalização em “YES”.

Por fim, todos os arquivos de resultado da simulação em questão foram alocados numa única pasta, analogamente ao exemplo para o caso do nylon (Figura 150). Nesse exemplo, são mostrados os arquivos finais alocados na pasta “MIF_ nylon”. Isso foi feito para organizar os dados a serem avaliados na etapa seguinte (Etapa 5).

FIT2D GRAPHICS WINDOW

OUTPUT FILES BASE NAME AND EXTENSION

O.K. CANCEL ? HELP INFO

DESCRIPTIONS	VALUES	CHANGE
DIRECTORY PATH FOR FILE OUTPUT	E:\Simulacao_FI TD2\	OUTPUT DIRECTORY
BASE NAME FOR FILE SEQUENCE	MIF_nylon_	BASENAME
EXTENSION OF OUTPUT FILES	.dat	EXTENSION

Click on variable to change, or 'O.K.'

Figura 149 – Tela do *software* fit2d para armazenar o resultado obtido na saída da integração, em formato “.dat”. Nesta tela, o resultado também pode ser armazenado em formato “.chi”.

Fonte: Autoria própria.

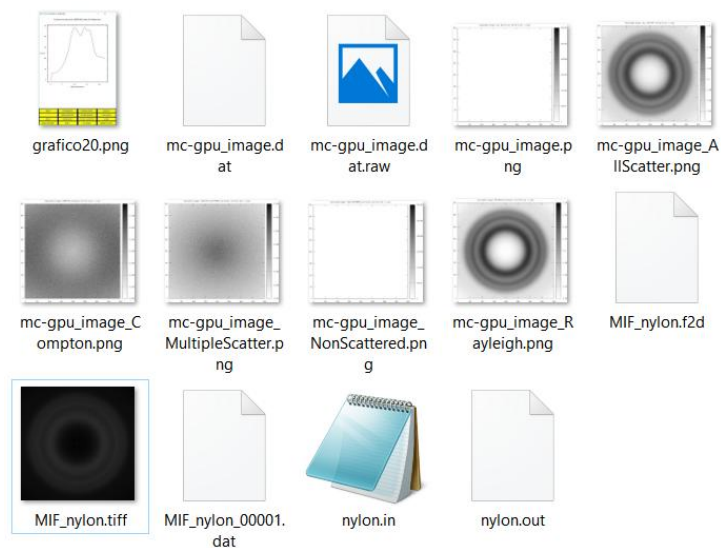


Figura 150 – Visualização final dos arquivos na pasta “MIF_nylon”, contendo os arquivos para o caso do *phantom 1*, na combinação de nylon com MIF.

Fonte: Autoria própria.

Todos esses procedimentos deste tópico 4 foram realizados para cada um dos arquivos com extensão “.tiff” obtidos na etapa anterior (Etapa 3).

Os resultados finais obtidos seguiram para a Etapa 5, descrita no Capítulo 5 (Resultados e discussões), para avaliação de cada perfil de espalhamento.

ANEXO B – CÓDIGOS COMPLETOS ADAPTADOS PELA AUTORA

ANEXO B.1 – GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E UM CILINDRO MENOR INTERNO

```

#include<stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include<math.h>

int main(){

//Variaveis de entrada:
    int h1, h2, h3, h4, k1, k2, k3, k4; //centros dos cilindros
    int x, y, z; //variaveis utilizadas para percorrer toda a geometria
    float d1, d2, d3, d4, d5;      //Densidade dos materiais

    int vxy = 400, vz = 1000;      //numero de voxels da geometria
    float tvox = 0.001;            //tamanho dos voxels em cm

//Titulo:
    printf("Geracao do arquivo para o MC-GPU: GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E
UM CILINDRO MENOR INTERNO.\n");

//Densidades dos materiais:
    printf("Digite a densidade do material fora do cilindro (g/cm3).\n");
    fflush(stdin);
    scanf("%f", &d1);

    printf("Digite a densidade do material do cilindro maior (g/cm3).\n");
    fflush(stdin);          //fflush(stdin) - funcao que limpa o buffer do
teclado
    scanf("%f", &d2);

    printf("Digite a densidade do material do cilindro interno (g/cm3).\n");
    fflush(stdin);          //fflush(stdin) - funcao que limpa o buffer do
teclado
    scanf("%f", &d3);

//Centro das circunferencias (secao transversal de cada cilindro):
    h3=200;
    k3=200;

    h2=200;
    k2=200;

//Criacao do arquivo de saida:
    FILE *fp;
    fp=fopen("Cilindro.vox", "w"); //Cria uma file com as informacoes -
parametros: (nome da file.vox, tipo de arquivo criado w=writing)
    if(fp==NULL){
        printf("Problemas na abertura o arquivo.\n");
        exit(1);
    }
    fprintf(fp, " [SECTION VOXELS HEADER v.2008-04-13]\n"); //fprintf -
escreve dentro de File
    fprintf(fp, " %i %i %i VOXELS IN X,Y,Z\n", vxy, vxy, vz);

```

```

        fprintf(fp, " %f %f %f VOXEL SIZE (cm) X,Y,Z\n", tvox, tvox, tvox);
        fprintf(fp, " 1 COLUMN NUMBER WHERE MATERIAL ID IS
LOCATED\n");
        fprintf(fp, " 2 COLUMN NUMBER MASS DENSITY\n");
        fprintf(fp, " 1 BLANK LINES END OF X,Y-CYCLES
(1=YES,0=NO)\n");
        fprintf(fp, " [END OF VXH SECTION]\n");
        fprintf(fp, " # Mat# [nx++,ny+,nz] -- dens(g/cm^3):\n");

        for(z=1;z<=vz;z++){
            for(int y = 1; y <= vxy; y++){
                for(int x = 1; x <= vxy; x++){
                    if (pow((x-h2),2.0) + pow((y-k2),2.0) <= pow((vxy/2),2.0)){
                        if (pow((x-h3),2.0) + pow((y-k3),2.0) <= pow((vxy/8),2.0)){
                            fprintf(fp, " 3 %f\n", d3);
                            printf(" 3 %f\n", d3);
                        }
                        else{
                            fprintf(fp, " 2 %f\n", d2);
                            printf(" 2 %f\n", d2);
                        }
                    }
                    else{
                        fprintf(fp, " 1 %f\n", d1);
                        printf(" 1 %f\n", d1);
                    }
                }
                fprintf(fp, "\n");
                printf("\n");
            }
        }
        fclose(fp);

//Finalização do código:
        return 0;
}

```

ANEXO B.2 – GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS

```

#include<stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include<math.h>

int main(){

//Variáveis de entrada:
    int h1, h2, h3, h4, k1, k2, k3, k4; //centros dos cilindros
    int x, y, z; //variáveis utilizadas para percorrer toda a geometria
    float d1, d2, d3, d4, d5; //Densidade dos materiais

    int vxy = 400, vz = 1000; //numero de voxels da geometria
    float tvox = 0.001; //tamanho dos voxels em cm

```

```

//Titulo:
printf("Geracao do arquivo para o MC-GPU: GEOMETRIA COM UM CILINDRO EXTERNO E
DOIS CILINDROS MENORES INTERNOS.\n");

//Densidades dos materiais:
printf("Digite a densidade do material fora do cilindro (g/cm3).\n");
fflush(stdin);
scanf("%f", &d1);

printf("Digite a densidade do material do cilindro maior (g/cm3).\n");
fflush(stdin); //fflush(stdin) - funcao que limpa o buffer do
teclado
scanf("%f", &d2);

printf("Digite a densidade do material do cilindro interno inferior
(g/cm3).\n");
fflush(stdin); //fflush(stdin) - funcao que limpa o buffer do
teclado
scanf("%f", &d3);

printf("Digite a densidade do material do cilindro interno superior
(g/cm3).\n");
fflush(stdin); //fflush(stdin) - funcao que limpa o buffer do
teclado
scanf("%f", &d4);

//Centro das circunferencias (secao transversal de cada cilindro):
h2=200;
k2=200;

h3=200;
k3=100;

h4=200;
k4=300;

//Criacao do arquivo de saida:
FILE *fp;
fp=fopen("Cilindro.vox", "w"); //Cria uma file com as informacoes -
parametros: (nome da file.vox, tipo de arquivo criado w=writing)
if(fp==NULL){
printf("Problemas na abertura o arquivo.\n");
exit(1);
}
fprintf(fp, " [SECTION VOXELS HEADER v.2008-04-13]\n"); //fprintf -
escreve dentro de File
fprintf(fp, " %i %i %i VOXELS IN X,Y,Z\n", vx, vxy, vz);
fprintf(fp, " %f %f %f VOXEL SIZE (cm) X,Y,Z\n", tvox, tvox, tvox);
fprintf(fp, " 1 COLUMN NUMBER WHERE MATERIAL ID IS
LOCATED\n");
fprintf(fp, " 2 COLUMN NUMBER MASS DENSITY\n");
fprintf(fp, " 1 BLANK LINES END OF X,Y-CYCLES
(1=YES,0=NO)\n");
fprintf(fp, " [END OF VXH SECTION]\n");
fprintf(fp, " # Mat# [nx++,ny+,nz] -- dens(g/cm^3):\n");

for(z=1;z<=vz;z++){
for(int y = 1; y <= vxy; y++){

```

```

for(int x = 1; x <= vxy; x++){
    if (pow((x-h2),2.0) + pow((y-k2),2.0) <= pow((vxy/2),2.0)){
        if (pow((x-h3),2.0) + pow((y-k3),2.0) <= pow((vxy/8),2.0)){
            fprintf(fp, " 3 %f\n", d3);
            printf(" 3 %f\n", d3);
        }
        if(pow((x-h4),2.0) + pow((y-k4),2.0) <= pow((vxy/8),2.0)){
            fprintf(fp, " 4 %f\n", d4);
            printf(" 4 %f\n", d4);
        }
        if((pow((x-h3),2.0) + pow((y-k3),2.0) > pow((vxy/8),2.0)) &&
(pow((x-h4),2.0) + pow((y-k4),2.0) > pow((vxy/8),2.0))){
            fprintf(fp, " 2 %f\n", d2);
            printf(" 2 %f\n", d2);
        }
    }
    if (pow((x-h2),2.0) + pow((y-k2),2.0) > pow((vxy/2),2.0)){
        fprintf(fp, " 1 %f\n", d1);
        printf(" 1 %f\n", d1);
    }
}
fprintf(fp, "\n");
printf("\n");
}
}
fclose(fp);

//Finalização do código:
return 0;
}

```

ANEXO C – CÓDIGO PARA GERAÇÃO DAS IMAGENS COM O GNUPLOT

```
#!/usr/bin/gnuplot

# -- Represent the 2D image simulated with MC-GPU:
#   The name of the data file must be "mc-gpu_image.dat".
#   To use log scale I can calculate "-log10($1)" or press "l" after clicking the
#   graphic.

#set yrange[0: 349]
#set xrange[0:1299]
#set zrange[0:0.3]
#set cbrange[0:0.3]

set size ratio -1
# Determine voxel color from corner left-bottom:
set pm3d map corners2color c1
set palette gray negative

# set xlabel "X (pixel)"
# set ylabel "Z (pixel)"

set title "Simulated image: ALL particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using ($1+$2+$3+$4) notitle
pause -1 " --Press enter for next image..."

set title "Simulated image: NON-SCATTERED particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 1 notitle
pause -1 " --Press enter for next image..."

set title "Simulated image: ALL SCATTER [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using ($2+$3+$4) notitle
pause -1 " --Press enter for next image..."

set title "Simulated image: COMPTON particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 2 notitle
pause -1 " --Press enter for next image..."

set title "Simulated image: RAYLEIGH particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 3 notitle
pause -1 " --Press enter for next image..."

set title "Simulated image: MULTIPLE-SCATTERED particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 4 notitle

pause -1 " --Press enter to save images in PNG format and exit... "

#####
# OUTPUT png IMAGES:

#set autoscale

set terminal png large size 2000,1000 crop
# set terminal postscript eps

set output 'mc-gpu_image.png'
set title "Simulated image: ALL particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using ($1+$2+$3+$4) notitle

set output 'mc-gpu_image_NonScattered.png'
set title "Simulated image: NON-SCATTERED particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 1 notitle
```

```
set output 'mc-gpu_image_AllScatter.png'
set title "Simulated image: ALL SCATTER [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using ($2+$3+$4) notitle

set output 'mc-gpu_image_Compton.png'
set title "Simulated image: COMPTON particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 2 notitle

set output 'mc-gpu_image_Rayleigh.png'
set title "Simulated image: RAYLEIGH particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 3 notitle

set output 'mc-gpu_image_MultipleScatter.png'
set title "Simulated image: MULTIPLE-SCATTERED particles [eV/cm^2 per x-ray]"
splot "mc-gpu_image.dat" using 4 notitle

pause 0.1 " --Done! "
```

**ANEXO D – EXEMPLO DE ARQUIVO DE SAÍDA COM EXTENSÃO “.OUT”:
combinação com MIF de água e nylon nos cilindros internos do *phantom 2*, com
a fonte em $y = 0,3$ mm**

```

*****
***          MC-GPU, version 1.3 (http://code.google.com/p/mcgpu/)          ***
***                                                                 ***
***  A. Badal and A. Badano, "Accelerating Monte Carlo simulations of      ***
***  photon transport in a voxelized geometry using a massively parallel  ***
***  Graphics Processing Unit", Medical Physics 36, pp. 4878-4880 (2009) ***
***                                                                 ***
***          Andreu Badal (Andreu.Badal-Soler@fda.hhs.gov)              ***
*****

***** Code execution started on: Tue Nov 14 11:32:47 2017

*** SIMULATION IN THE CPU ***

-- INITIALIZATION phase:

-- Reading the input file 'aguanylon.in':
Material dose deposition tally DISABLED.
3D voxel dose deposition tally DISABLED.

Rotations from the input direction to +Y [deg]: rotZ = -90.000000 , rotX =
0.000000
Rotations from +Y to the input direction for the fan beam source model
[deg]: rotZ = 90.000000 , rotX = 0.000000
Array for 4 scatter images correctly allocated (160000 pixels, 4.882812
Mbytes)
-- Reading the energy spectrum and initializing the Walker aliasing sampling
algorithm.
    x-ray tracks to simulate = 100000000000
        initial random seed = 1234567890
    azimuthal (phi), polar apertures = 0.000000 , 0.000000 degrees
        focal spot position = (0.500000, 0.300000, 0.500000)
        source direction = (-1.000000, 0.000000, 0.000000)
        initial angle from X = 0.000000
        source-detector distance = 21.000000 cm
            detector center = (-20.500000, 0.300000, 0.500000)
        detector low corner (at +Y) = (-9.700000, 20.500000, -9.500000)
        number of pixels image = 400x400 = 160000
            pixel size = 0.050x0.050 cm
        number of projections = 1
            Input voxel file = Cilindro.vox.gz
            Output image file = mc-gpu_image.dat

            Energy spectrum file = 8.54keV.spc
        number of energy bins read = 1
        minimum, maximum energies = 8.540, 8.540 keV
        mean energy spectrum = 8.540 keV

-- Reading voxel file 'Cilindro.vox.gz':
Number of voxels in the input geometry file: 400 x 400 x 1000 = 160000000
Size of the input voxels: 0.001000 x 0.001000 x 0.001000 cm (voxel
volume=0.000000 cm^3)
Voxel bounding box size: 0.400000 x 0.400000 x 1.000000 cm

-- Initializing the voxel material and density vector (1220.703125 Mbytes)...
Total number of voxels read: 160000000

```

```

Total CPU memory allocated for voxels vector and data structures =
1227.055054 Mbytes

-- Reading the material data files (MAX_MATERIALS=15):
  Mat 1: File 'k_ar.mcgpu.gz'
        Nominal density = 0.001205 g/cm^3; Max density in voxels = 0.001205
g/cm^3
        Number of energy values in the mean free path database: 23002.
        Linear interpolation data correctly allocated (8.072601 Mbytes)
        Lowest energy first bin = 5000.000000 eV, last bin = 124994.783060
eV; bin width = 5.216938 eV
  Mat 2: File 'k_PMMA.mcgpu.gz'
        Nominal density = 1.190000 g/cm^3; Max density in voxels = 1.190000
g/cm^3
  Mat 3: File 'k_agua.mcgpu.gz'
        Nominal density = 1.000000 g/cm^3; Max density in voxels = 1.000000
g/cm^3
  Mat 4: File 'k_nylon.mcgpu.gz'
        Nominal density = 1.140000 g/cm^3; Max density in voxels = 1.140000
g/cm^3

-- INITIALIZATION finished: elapsed time = 73.645 s.

-- MONTE CARLO LOOP phase. Time: Tue Nov 14 11:34:01 2017

Executing 1000000000 history batches in the CPU, with 100 histories in each
batch: 100000000000 histories in total.

[... a Compton event tried to increase the x ray energy due to precision
error. Keeping initial energy. (This warning will not be repeated.)]
  scaling=1.00000858306885, costh_Compton=0.96471722313877
[... Small numerical precision error detected computing "pzomc" in GCOa
(this warning will not be repeated).]
  i__=0, aux=0.000000000000000, temp=0.000000000000000,
pzomc(forced)=0.00200000009499, uico=0.000000000000000, energy=8540.0000000,
cgco_SHARED->fj0=128.58625793457031, mat=3, cdt1=0.000000000000000
[... Small numerical precision error detected computing "af" in GCOa
(this warning will not be repeated)].
  xqc=0.000000000000000, af(forced)=0.00200000009499,
tau=1.000000000000000, costh_Compton=1.000000000000000

*** IMAGE TALLY PERFORMANCE REPORT ***
  Simulated x rays:    100000000000
  Simulation time [s]: 43336.74
  Speed [x-rays/s]:   2307510.80

  Fraction of initial energy arriving at the detector (over the mean
energy of the spectrum): 12.544%
  Maximum energy detected in pixel 80199: (x,y)=(199,200). Maximum
pixel value = 407744.456056 eV/cm^2

==> CUDA: Time reporting the dose data: 0.000001 s

-- SIMULATION FINISHED!

***** TOTAL SIMULATION PERFORMANCE (including initialization and reporting)
*****

```



```
>>> Execution time including initialization, transport and report:
43410.599 s.
>>> Time spent in the Monte Carlo transport only: 43336.742 s.
>>> Time spent in initialization, reporting and clean up: 73.857 s.

>>> Total number of simulated x rays: 100000000000
>>> Total speed (using 1 thread, including initialization time) [x-
rays/s]: 2303584.87
```

```
***** Code execution finished on: Tue Nov 14 23:36:32 2017
```