

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JÚLIO DE MESQUITA
FILHO
INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS
CAMPUS DE BOTUCATU

Desenvolvimento de Algoritmos para Trajetórias de Prótons em Tratamentos Radioterápicos

Gabriel Luis Bueno Faustino

Orientador: Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza

Botucatu, Novembro de 2024

Gabriel Luis Bueno Faustino

Desenvolvimento de Algoritmos para Trajetórias de Prótons em Tratamentos Radioterápicos

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de
Biociências, Campus de Botucatu, UNESP.

Orientador: Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza

Botucatu

2024

F268d

Faustino, Gabriel Luis Bueno

Desenvolvimento de algoritmos para trajetórias de prótons em tratamentos radioterápicos / Gabriel Luis Bueno Faustino. -- Botucatu, 2024

25 p.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Física Médica) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Biociências, Botucatu

Orientador: Joel Mesa Hormaza

1. Física. 2. Física médica. 3. Terapia com prótons. I. Título.

Gabriel Luis Bueno Faustino

Desenvolvimento de Algoritmos Computacionais Para Trajetórias de Protões em Tratamentos Radioterápicos

Trabalho de Conclusão de Curso,
apresentado a Universidade Estadual
Paulista, como parte das exigências
para a obtenção do título de
Bacharel, do curso de Graduação em
Física Médica.

Botucatu, 11 de Dezembro de 2024.
(data da defesa)

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 **JOEL MESA HORMAZA**
Data: 12/12/2024 15:39:26-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Joel Mesa Hormaza
Departamento de Física e
Farmacologia

Roberto Morato Fernandez
Departamento de Física e
Farmacologia

Carlos Alexandre Henrique
Fernandes
Departamento de Física e
Farmacologia

À minha namorada Flávia pelo suporte incondicional.
À minha família, que sempre esteve ao meu lado.
Aos meus amigos e orientadores, que tornaram possível esta jornada.

*"Para pequenas criaturas como nós, a vastidão é
suportável somente através do amor."
(Carl Sagan)*

Agradecimentos

À minha namorada, Flávia Rodrigues, que serviu como alicerce e me deu apoio constante durante todo este processo. Sua paciência, amor e suporte foram essenciais para que eu pudesse me concentrar neste projeto.

À minha família, pela base sólida e inabalável que sempre me proporcionaram.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza, pela paciência e apoio em cada etapa deste trabalho.

Aos amigos, que, por meio de conversas e debates, enriqueceram minha vivência acadêmica e tornaram a jornada mais agradável.

Resumo

O câncer é uma das principais causas de morte, com uma incidência de casos cada vez maior, constituindo um desafio significativo para a saúde pública mundial. A radioterapia, em particular a protonterapia, é uma das principais estratégias para o tratamento do câncer, e seu desenvolvimento tem se beneficiado de tecnologias de ponta como o uso de feixes de prótons, que possuem propriedades únicas, como o pico de Bragg, no qual a maior parte da energia é depositada diretamente no tumor.

Este trabalho discute os mecanismos fundamentais envolvidos na interação de partículas carregadas com a matéria, com destaque nas teorias de Bethe-Bloch e a correção de Fermi-Eyges para Molière, que descrevem a perda de energia e o espalhamento múltiplo de Coulomb - MCS - respectivamente. A equação de Bethe-Bloch representa a dissipação de energia das partículas carregadas ao interagirem com os elétrons da matéria, sendo fundamental para entender a distribuição de energia e a profundidade dos feixes de prótons. A teoria de Molière, corrigida por Fermi-Eyges, descreve como as partículas se espalham devido a colisões com os núcleos atômicos, influenciando diretamente a precisão da dose administrada e a qualidade das imagens de tomografia por prótons.

No entanto, a modelagem das trajetórias das partículas apresenta obstáculos, principalmente por causa da natureza estocástica dos processos de espalhamento e à necessidade de elevados custos computacionais para simulações precisas. Este trabalho propõe o desenvolvimento de um algoritmo que emprega métodos determinísticos, se baseando nas teorias de Bethe-Bloch e Fermi-Eyges, para aproximar as trajetórias de prótons de maneira eficaz, sem comprometer a precisão dos resultados. Isso visa reduzir o custo computacional. Além disso, a validação prática do algoritmo será realizada, comparando os resultados simulados com dados experimentais de protonterapia, garantindo sua aplicabilidade em tratamentos clínicos. O trabalho também explora as limitações da equação de Bethe-Bloch, como as correções de Bremsstrahlung e os efeitos nucleares, sugerindo ajustes e correções necessárias para otimizar os tratamentos de protonterapia.

Abstract

Cancer is one of the leading causes of death, with an increasing incidence of cases, constituting a significant challenge for global public health. Radiotherapy, particularly proton therapy, is one of the main strategies for treating cancer, and its development has benefited from cutting-edge technologies such as the use of proton beams, which have unique properties, such as the Bragg peak, in which most of the energy is deposited directly in the tumor. This paper discusses the fundamental mechanisms involved in the interaction of charged particles with matter, highlighting the Bethe-Bloch and Molière theories, which describe energy loss and multiple Coulomb scattering - MCS - respectively. The Bethe-Bloch equation represents the dissipation of energy of charged particles when interacting with electrons in matter, and is fundamental to understanding the energy distribution and depth of proton beams. Molière's theory describes how particles scatter due to collisions with atomic nuclei, directly influencing the accuracy of the administered dose and the quality of proton tomography images.

However, modeling particle trajectories presents challenges, mainly due to the stochastic nature of scattering processes and the need for high computational costs for accurate simulations. This work proposes the development of an algorithm model that employs deterministic methods, such as the polynomial model, to effectively approximate proton trajectories without compromising the accuracy of the results. This aims to reduce computational costs.

In addition, practical validation of the algorithm will be performed by comparing the simulated results with experimental proton therapy data, ensuring its applicability in clinical treatments. The work also explores the limitations of the Bethe-Bloch equation, such as Bremsstrahlung corrections and nuclear effects, suggesting adjustments and corrections needed to optimize proton therapy treatments.

Sumário

Resumo	4
Abstract	5
1 Introdução	9
2 Teoria de Molière	10
3 Teoria de Fermi-Eyges	12
3.1 A Equação de Bethe-Bloch	13
3.2 Correções de Bremsstrahlung (Radiação de Frenagem)	14
4 Material e Métodos	14
4.1 Desenvolvimento dos Modelos Computacionais	14
4.2 Interpolação dos Dados	15
5 Resultados e Discussão	15
6 Conclusões	22
Referências	23
A Anexos	24
A.1 Código para Interpolação de Dados	24

Lista de Figuras

1	<i>Stopping power</i> em função da energia (MeV) para água, baseado em dados do NIST.	16
2	<i>Stopping power</i> interpolado para água, obtido via simulação em Python. .	16
3	<i>Stopping power</i> calculado para água com a equação de Bethe-Bloch. . . .	16
4	<i>Stopping power</i> em função da energia (MeV) para o tecido equivalente A150, com dados do NIST.	17
5	<i>Stopping power</i> interpolado para A150, obtido via simulação em Python . .	17
6	<i>Stopping power</i> calculado para A150 com a equação de Bethe-Bloch	17
7	<i>Stopping power</i> em função da energia (MeV) para o tecido equivalente B100, com dados do NIST.	18
8	<i>Stopping power</i> interpolado para B100, obtido via simulação em Python. .	18
9	<i>Stopping power</i> calculado para B100 com a equação de Bethe-Bloch. . . .	18
10	Representação de uma trajetória linear em fantoma heterogêneo	19
11	Representação de uma trajetória parabólica em fantoma heterogêneo	19
12	Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em água.	21
13	Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em A150	21
14	Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em B100	21

Lista de Tabelas

- 1 Valores de perda de energia em MeV obtidos na saída de cada fantoma homogêneo. Os valores foram calculados para diferentes trajetórias. 19
- 2 Perda de energia em MeV para fantasmas não-homogêneos. Os valores foram calculados para trajetória retilínea e parabólica. 19

1 Introdução

O câncer é um dos maiores problemas de saúde pública no mundo, sendo uma das maiores causas de morte, afetando a expectativa de vida das pessoas. Na maioria dos países, o câncer representa a primeira ou a segunda causa de morte prematura antes dos 70 anos e a incidência de casos está aumentando rapidamente ao longo dos anos. De acordo com dados do GLOBOCAN (*Global Cancer Observatory*) e do IARC (*International Agency for Research on Cancer*) houve 19,3 milhões de novos casos de câncer no mundo [1].

A radioterapia utiliza dois métodos importantes de tratamento do câncer ,teleterapia e braquiterapia, que podem ser combinados com outros métodos ,cirurgia e quimioterapia. A teleterapia consiste do uso de um acelerador linear de partículas que gera um feixe radioterápico como produto final, podendo este ser um feixe de elétrons, de raios X ou prótons. Tais feixes interagem de maneiras diferentes com o meio biológico. Em um panorama geral, a radiação possui dois mecanismos de interação com a matéria: mecanismos diretos e indiretos. Os mecanismos diretos ocorrem quando a radiação interage diretamente com as moléculas de DNA, causando danos (aberrações cromossômicas) como quebras de ligações simples ou duplas , ligações cruzadas, alterações nos açúcares presentes em sua estrutura ou em bases. Já os mecanismos indiretos ocorrem quando a radiação atinge as moléculas de água presentes no meio e as ionizam (radiólise) gerando radicais livres altamente reativos que produzem uma cascata de reações químicas quebrando fitas de moléculas de DNA: os elétrons livres resultantes da ionização da água têm a capacidade de polarizar as moléculas próximas, formando um elétron-hidratado (e_{aq}^-) de vida útil relativamente longa. Os radicais $H^\bullet$, $OH^\bullet$ e estes elétrons se propagam e reagem com as biomoléculas, podendo danificá-las. No rastro destas radiações com alta transferência linear de energia (LET) a densidade de radicais é grande e ocorrem muitas recombinações. Para radiações com baixo LET, o processo de interação que leva ao dano celular é entendido como sendo causado principalmente por radicais livres advindos do mecanismo indireto [2].

A dose absorvida é definida como sendo a energia absorvida pelo meio (normalmente expressa em Joules) por unidade de massa (Kg) definida em Gray (Gy). Doses iguais para diferentes tipos de radiação não produzem o mesmo efeito biológico, por conta disso, foi definido a efetividade biológica relativa (RBE) que é definida como a razão entre a dose de radiação de referência, que produz um determinado efeito biológico, e a dose de radiação em estudo, necessária para produzir o mesmo efeito. A dose requisitada para um feixe de prótons é 10% inferior comparada com a dose exigida em um feixe de raios X. Com o passar dos anos, diferentes técnicas de administração de tratamento foram desenvolvidas com o objetivo de elevar a razão terapêutica, que por definição, é a razão entre a dose tolerada pelo tecido saudável e a dose curativa ou efetiva entre a ponderação de doses ao alvo e áreas adjacentes.

Os prótons interagem com a matéria através de três meios de interação: perdem ener-

gia e cessam seu movimento devido às múltiplas colisões eletromagnéticas com elétrons, conhecido como freamento. Os prótons se espalham por colisões eletromagnéticas com núcleos atômicos no que é conhecido por espalhamento múltiplo de Coulomb (MCS) levando a uma deflexão mínima de ângulos pequenos o que amplia o feixe. Por fim, sofrem grandes dispersões com o núcleo atômico ou seus constituintes (prótons, nêutrons) o que é conhecido como interações nucleares [3]. Tais deflexões são independentes e estatisticamente aleatórias, resultando em incertezas que comprometem tanto a precisão da dose na protonterapia quanto a qualidade das imagens na protonterapia e em aplicações diagnósticas, como na tomografia por prótons. Como resultado, gera um deslocamento lateral cumulativo do feixe de prótons, intensificando a penumbra do campo de radiação e comprometendo a determinação da dose na borda do volume alvo. Existem teorias para os dois primeiros processos: a teoria de Bethe-Bloch para o freamento e a teoria de Molière para o MCS[4]. Em tais sistemas, os desvios angulares tornam a reconstrução exata das trajetórias mais complexa, resultando em incertezas que limitam a qualidade das imagens. Para contornar essa incerteza foi introduzido o conceito de caminho mais provável (MLP). O MLP representa a trajetória mais provável seguida por um próton enquanto atravessa o tecido, considerando os desvios causados pelo espalhamento. Já a segunda interação é a absorção do próton pelo núcleo atômico, a qual emitirá partículas secundárias no meio, causando um aumento da fluência. [5].

A determinação do MLP e a modelagem detalhada das trajetórias apresentam desafios devido às suas exigências computacionais por se tratarem de processos estocásticos. Uma ferramenta poderosa que lida com este tipo de problema é o Método de Monte Carlo (MC). Este é um modelo estatístico que utiliza uma sequência de números aleatórios para a realização de uma simulação. Na protonterapia, pode-se considerar como um grupo de partículas cujas coordenadas mudam aleatoriamente a cada colisão. Neste caso, o único requisito necessário é que as interações sejam descritas por funções de densidades de probabilidade. Desta forma, as simulações de Monte Carlo, proporcionam uma estimativa precisa dessas trajetórias, mas demandam um alto custo de processamento e tempo. Consequentemente, esforços têm sido direcionados para desenvolver soluções analíticas e determinísticas que preservem a precisão necessária, ao mesmo tempo que reduzam a complexidade computacional [6].

2 Teoria de Molière

Para a modelagem da trajetória de partículas em um alvo utilizando feixes de prótons, utilizamos a geometria previamente definida, além das propriedades físicas obtidas experimentalmente. Nesse contexto, foram analisados o caminho mais provável do próton na matéria, a distribuição da energia com a profundidade, o poder de parada (*stopping power*) dos materiais e o poder de parada relativo à água.

O ângulo de deflexão de Molière para a trajetória mais provável é dado pela seguinte expressão:

$$\theta = \frac{\theta_H}{\sqrt{\chi_c B}}$$

De acordo com Scott [7], o parâmetro B é expresso como:

$$B = 1,153 + 2,583 \log \left(\frac{\chi_c}{\chi_a} \right)^2$$

Tabata e Ito [8] forneceram uma definição mais precisa para B :

$$B = 2,600 + 2,3863 \log \left(\frac{\chi_c}{\chi_a} \right)^2 - \frac{3,234}{\log \left(\frac{\chi_c}{\chi_a} \right)^2 + 0,994}$$

Neste formalismo, o ângulo característico χ_c é selecionado de forma que a probabilidade total de espalhamento por um ângulo maior que χ_c seja unitária.

$$\chi_c = \frac{4\pi N e^4 Z(Z+1)z^2}{A (pv)^2}$$

Onde: - N é o número de Avogadro, - A e Z são, respectivamente, o número de massa e o número atômico do material do alvo, - z , v e p são o número atômico (com $z = 1$ para o próton H^+), a velocidade inicial e o momento inicial da partícula incidente.

Molière derivou uma expressão aproximada para o ângulo de rastreio, dado por:

$$\chi_a = \chi_0 \left(1,13 + 3,76 \left(\frac{\alpha Z z}{\beta} \right)^2 \right)$$

onde α é a constante de estrutura fina ($1/137,03604$) e $\beta = v/c$, com $\chi_0 = \lambda/a$, sendo λ o comprimento de onda de de Broglie da partícula incidente e a o raio de Fermi.

O espalhamento angular característico θ_H , resultante da interação do próton com o meio, depende da densidade e composição química do material, enquanto o próton perde energia e velocidade ao longo de sua trajetória.

$$\theta_H = \theta_M \sqrt{1 - \frac{0,7}{B}}$$

onde $\theta_M = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_c \sqrt{B}$ é o ângulo característico de Molière para o espalhamento múltiplo Coulombiano.

Para calcular o deslocamento lateral do feixe das partículas carregadas em diferentes profundidades, a fórmula é dada por:

$$y_{\text{RMS}} = 6^{-1/2} \theta_{\text{RMS}} t$$

3 Teoria de Fermi-Eyges

Fermi e Eyges propuseram uma teoria geral para partículas carregadas pesadas que sofrem perdas de energia e múltiplos espalhamentos em um meio. Esta teoria é uma aproximação de um feixe Gaussiano que cresce no espaço, com variações estatísticas para um conjunto de partículas.

A evolução do ângulo médio de deflexão ao longo da trajetória é dada por:

$$\theta^2(x) = \theta^2(0) + \int_0^x T(x') dx'$$

O deslocamento lateral médio da partícula é:

$$(y\theta)(x) = (y\theta)(0) + \theta^2(0)x + \int_0^x (x - x')T(x') dx'$$

E o quadrado do deslocamento lateral é dado por:

$$y^2(x) = y^2(0) + 2(y\theta)(0) + \theta^2(0)x^2 + \int_0^x (x - x')^2 T(x') dx'$$

onde x é a posição longitudinal, y e θ são, respectivamente, o deslocamento lateral e o ângulo de deflexão da partícula espalhada.

Para materiais homogêneos, Kanematsu [9] derivou uma aproximação da teoria de Fermi-Eyges para o espalhamento angular e a deflexão lateral, integrando analiticamente as equações. Os resultados são:

$$\theta^2 = f \frac{X_w}{S_o X_o} \log \left(\frac{R_o}{R} \right)$$

$$y = f \frac{X_w}{S_o X_o} \left(1 - \frac{R}{R_o} + \frac{R}{R_o} \log \left(\frac{R}{R_o} \right) \right) \frac{R_o}{S_o}$$

$$y^2 = f \frac{X_w}{S_o X_o} \left(\frac{1}{2} + \frac{1 - R^2}{2R_o^2} - 2\frac{R}{R_o} - \frac{R^2}{R_o^2} \log \left(\frac{R^2}{R_o^2} \right) \right) \left(\frac{R_o}{S} \right)^2$$

Onde X_w é o comprimento de radiação (quantidade característica do material que a partícula atravessa, que para a água é 36,08 g/cm²) e X_o é o comprimento de radiação para qualquer outro material; S_o é o poder de parada relativo do material, comparado com o poder de parada da água; R_o é o alcance máximo do próton no material para uma dada energia incidente, e R é a espessura do alvo.

O fator f depende do tipo de partícula e é expresso como:

$$f = 10^{-3} z^{-0,16} \left(\frac{m}{m_p} \right)^{-0,92}$$

onde m é a massa da partícula e m_p é a massa do próton.

O ângulo de Fermi-Eyges não depende diretamente da energia ao longo da trajetória. A energia incidente define o alcance máximo da partícula, e os cálculos são realizados a partir daí.

A protonterapia se beneficia do uso da equação de Bethe-Bloch para determinar a profundidade e a distribuição de energia dos prótons no tecido alvo. Como os prótons possuem um depósito de energia próximo do fim da trajetória, tendo sua dose máxima concentrada no pico de Bragg (região onde a maior parte da energia é depositada) a equação de Bethe-Bloch ajuda a determinar precisamente onde esse pico ocorre e como ele se distribui ao longo da profundidade. Isso é fundamental para o planejamento do tratamento, pois permite maximizar a dose no tumor enquanto minimiza o dano nos tecidos adjacentes.

3.1 A Equação de Bethe-Bloch

Foi inicialmente proposta por Hans Bethe em 1930 para descrever a taxa de perda de energia de partículas carregadas ao interagirem com os átomos dos tecidos biológicos. A equação descreve a perda de energia por ionização, sendo este o principal mecanismo de interação de partículas carregadas com a matéria. Tal equação é válida para partículas com velocidades que variam de não-relativísticas à relativísticas e também para partículas carregadas. A equação fornece uma descrição precisa da perda de energia por unidade de comprimento dx da partícula, sendo fundamental para entender como a dose de radiação se distribui em tecidos biológicos durante tratamentos radioterápicos. A equação de Bethe-Bloch descreve a taxa de perda de energia das partículas carregadas ($-dE/dx$) ao atravessar um material como:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi}{m_e c^2} \cdot \frac{n z^2}{\beta^2} \cdot \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2}{I(1-\beta^2)} \right) - \beta^2 \right] \quad (1)$$

em que:

$$n = \frac{N_A Z \rho}{A M_u}$$

onde:

- M_u : massa molar
- z : carga da partícula incidente (para prótons, $z=1$);
- Z : número atômico do núcleo;
- A : é a massa atômica do material;
- ρ : é a densidade do material;
- m_e : é a massa do elétron;

- c é a velocidade da luz,
- $\beta = v/c$ é a razão entre a velocidade da partícula e a velocidade da luz;
- I é a energia média de excitação do material que depende do tipo de material e da estrutura atômica.

3.2 Correções de Bremsstrahlung (Radiação de Frenagem)

Para partículas com muito alta energia, as correções por bremsstrahlung podem se tornar importantes, mas são geralmente pequenas para partículas pesadas como os prótons.

A equação de Bethe-Bloch proporciona uma descrição exata e eficaz da perda de energia das partículas carregadas que atravessam a matéria. Embora a equação seja amplamente utilizada para modelar trajetórias de prótons e outros íons pesados em radioterapia e pesquisa de partículas, a sua aplicação precisa de ajustes e correções em diferentes contextos, como radiação de alta energia e efeitos nucleares. A compreensão detalhada dessa equação é fundamental para otimizar os tratamentos de protonterapia, minimizando os efeitos colaterais e maximizando a eficácia no tratamento do câncer.

A modelagem precisa de trajetórias de partículas carregadas é um desafio significativo, especialmente quando se lida com processos estocásticos como o MCS e as colisões com os núcleos atômicos. Além disso, as limitações computacionais de métodos exatos, como as simulações de Monte Carlo, exigem um alto poder de processamento. A solução proposta por este trabalho é a utilização de métodos determinísticos, que mantêm a precisão necessária ao mesmo tempo que reduzem a complexidade computacional.

Objetivos

Desenvolver um código computacional eficaz para calcular trajetórias de prótons em contextos biológicos, os desafios discutidos, como o MCS e a perda de energia. Este modelo buscará combinar a precisão das teorias com a eficiência computacional.

4 Material e Métodos

4.1 Desenvolvimento dos Modelos Computacionais

Os fantasmas utilizados nas simulações têm dimensões de 20 cm x 20 cm e foram subdivididos em N regiões homogêneas, variando apenas o tipo de material que é composto, sendo eles: água, A150 e B100. A150 é um material análogo a tecidos moles e B100 a tecidos ósseos. Essa divisão foi fundamental para entender como o número atômico e a densidade afetam a deposição de energia ao longo da trajetória do feixe.

A escolha das subdivisões foi realizada com base em alguns critérios relacionados à resolução necessária para representar as interfaces entre os materiais com precisão, como: capacidade computacional, já que um número maior de divisões aumenta o custo computacional das simulações. Materiais heterogêneos necessitam de um número de divisões maiores para conseguir capturar as variações de densidade e propriedades físicas, como número atômico e massa atômica nas interfaces dos materiais. No caso dos fantasmas homogêneos, as divisões asseguraram uniformidade ao longo do material, enquanto que para os fantasmas heterogêneos, as divisões permitiram estudar detalhadamente as transições de densidades entre as regiões.

As tabelas 1 e 2 evidenciam a influência do aumento da complexidade das interfaces em fantasmas divididos em N regiões sobre os resultados obtidos. Especificamente, a união de materiais heterogêneos com trajetórias parabólicas evidenciou a deposição de energia nas interfaces, em decorrência do aumento do espalhamento lateral e das interações inelásticas.

Os modelos empregam a interpolação dos dados para simular a perda de energia em diferentes materiais e trajetórias, como também da equação de Fermi-Eyges para calcular o ângulo médio (θ_0) e a equação de Bethe-Bloch para determinar a perda de energia ($-\frac{dE}{dx}$) para comparar com os dados interpolados. Ambas as equações foram modeladas em Python, com parâmetros ajustados para simular os materiais citados anteriormente.

4.2 Interpolação dos Dados

Os valores de Stopping power (poder de freamento - (S_0)) foram obtidos das tabelas disponíveis no site do *National Institute of Standards and Technology* - NIST [10]. A biblioteca *Scipy* foi empregada para assegurar a exatidão dos cálculos, implementando métodos de interpolação cúbica, para garantir suavidade na curva. O valor das subdivisões N foi igual 10000. Em anexo há a tabela utilizada para a interpolação e um exemplo de um dos códigos utilizados para tal.

Para efeitos de comparação, a equação de Bethe-Bloch que calcula a perda de energia por unidade de caminho foi desenvolvida em Python, exemplificado no anexo.

O mesmo foi utilizado para outros materiais, mudando apenas a estrutura correspondente a cada material no código.

5 Resultados e Discussão

Os gráficos de interpolação produzidos em python se parecem com os dos que estão armazenados no NIST.

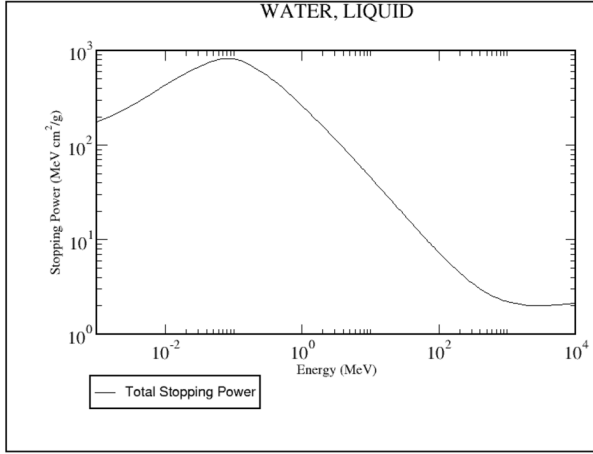


Figura 1: *Stopping power* em função da energia (MeV) para água, baseado em dados do NIST.

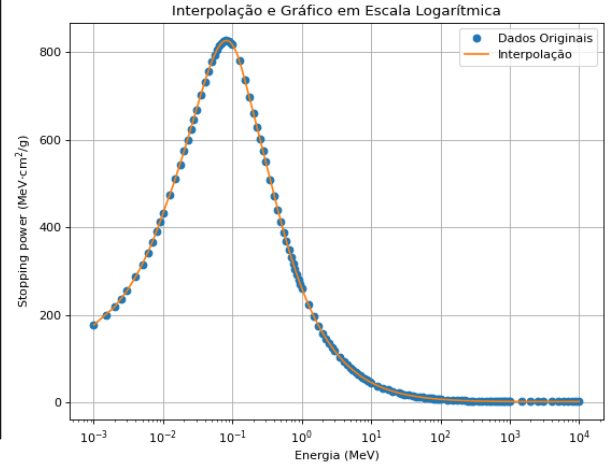


Figura 2: *Stopping power* interpolado para água, obtido via simulação em Python.

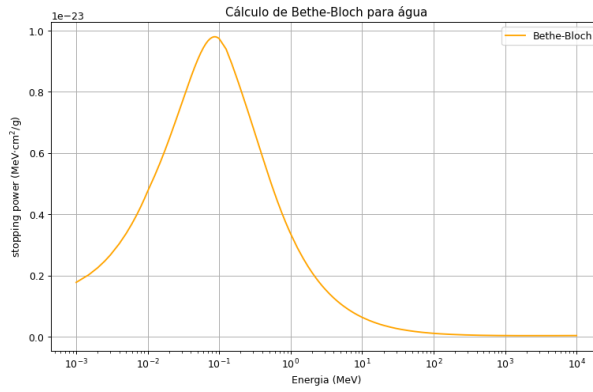


Figura 3: *Stopping power* calculado para água com a equação de Bethe-Bloch.

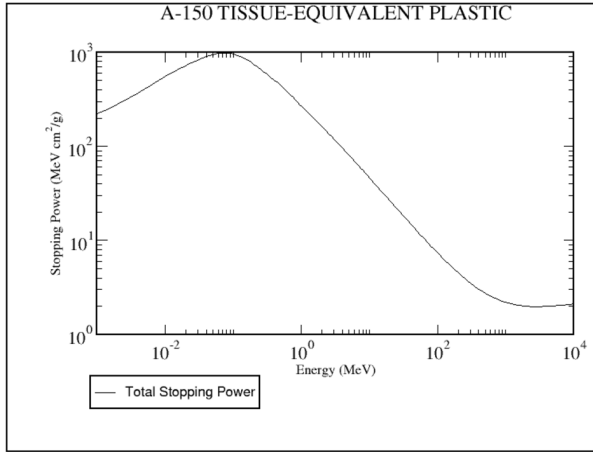


Figura 4: *Stopping power* em função da energia (MeV) para o tecido equivalente A150, com dados do NIST.

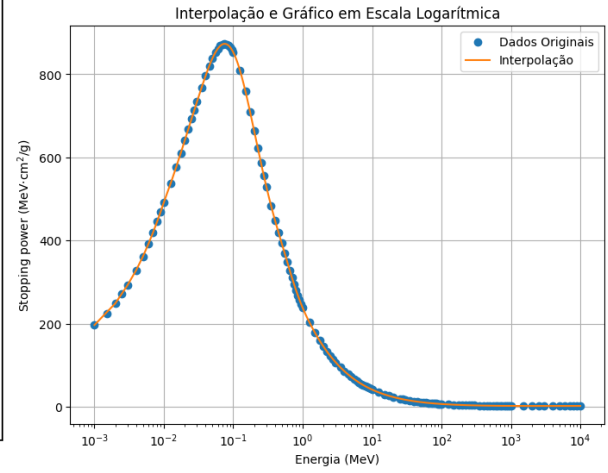


Figura 5: *Stopping power* interpolado para A150, obtido via simulação em Python

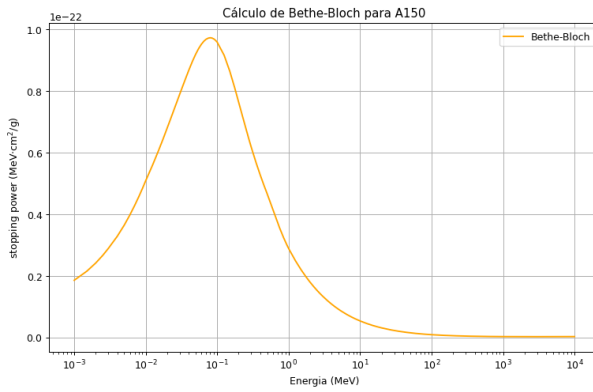


Figura 6: *Stopping power* calculado para A150 com a equação de Bethe-Bloch

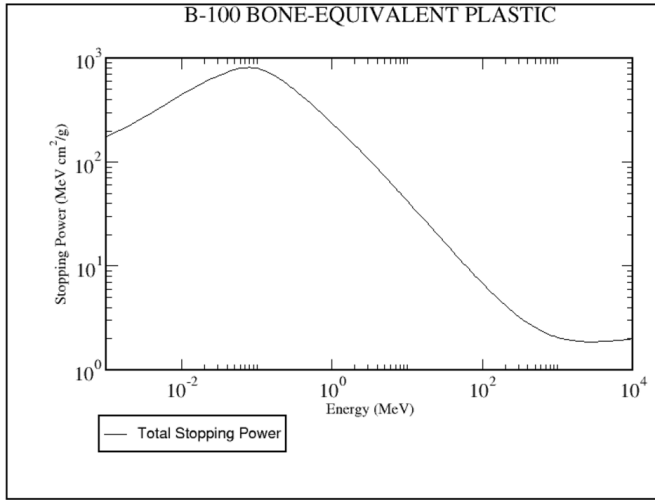


Figura 7: *Stopping power* em função da energia (MeV) para o tecido equivalente B100, com dados do NIST.

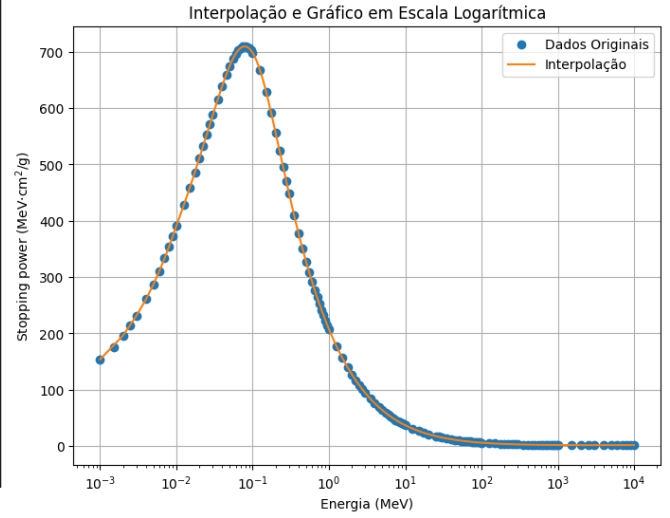


Figura 8: *Stopping power* interpolado para B100, obtido via simulação em Python.

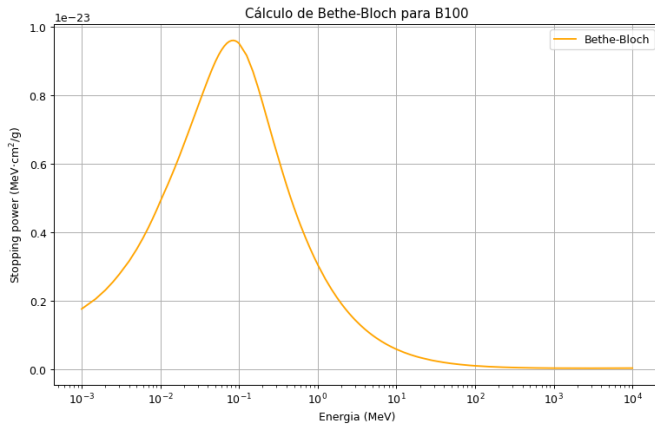


Figura 9: *Stopping power* calculado para B100 com a equação de Bethe-Bloch.

Os gráficos apresentados mostram o poder de freamento para os diferentes materiais (água, A150 e B100), apresentando os dados do NIST, as curvas interpoladas e os resultados fundamentados na equação de Bethe-Bloch. As figuras 1, 4 e 7 mostram o comportamento geral do poder de freamento em função da energia para água, A150 e B100, respectivamente, evidenciando uma tendência similar: valores elevados em baixas energias, com declínio em energias mais altas, conforme esperado para materiais homogêneos. As figuras 2, 5 e 8 ilustram a interpolação dos dados experimentais utilizando Python, obtendo uma boa correspondência entre os pontos originais e as curvas ajustadas, o que demonstra a eficácia do método de interpolação para cálculos em energias intermediárias. Já as figuras 3, 6 e 9 mostram os resultados teóricos extraídos da equação de Bethe-Bloch para os mesmos materiais, destacando o comportamento esperado, incluindo o "mínimo de ionização" em energias relativísticas. Ao comparar os gráficos experimentais e teóricos, nota-se um consenso generalizado, validando a adequação da equação de

Bethe-Bloch para descrever o poder de freamento nos materiais analisados. Pequenas discrepâncias podem ser atribuídas às diferenças entre as condições experimentais e as simplificações do modelo teórico, especialmente em energias mais altas. Esses resultados reforçam a importância dos modelos teóricos e computacionais na descrição da interação de prótons com os materiais citados anteriormente: água, A150 e B100.

Além disso, simulamos diferentes trajetórias para examinar o comportamento da deposição de energia em cada material. As trajetórias escolhidas foram retilíneas e parabólicas, que por serem simples, facilitaram a visualização da variação do stopping power nos materiais. O feixe incidente em cada fantoma foi de 200 MeV. Posteriormente, alocaram-se os dados obtidos dos códigos em Python em uma tabela para efeitos de comparação.

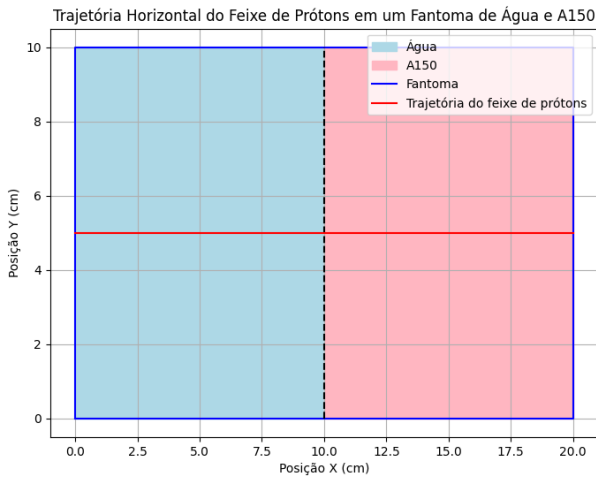


Figura 10: Representação de uma trajetória linear em fantoma heterogêneo

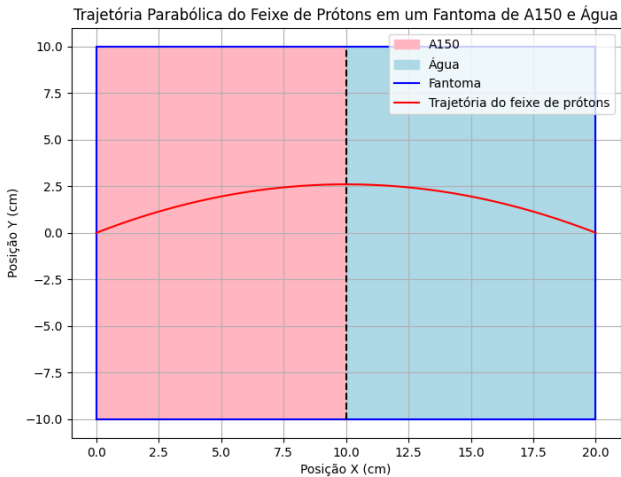


Figura 11: Representação de uma trajetória parabólica em fantoma heterogêneo

Tabela 1: Valores de perda de energia em MeV obtidos na saída de cada fantoma homogêneo. Os valores foram calculados para diferentes trajetórias.

	Água	A150	B100
Reta	86,97	85,95	97,08
Parábola	86,50	61,92	77,57

Em seguida, realizaram-se simulações para combinações de diferentes fantasmas e os valores também foram alocados, como mostrado abaixo

Tabela 2: Perda de energia em MeV para fantasmas não-homogêneos. Os valores foram calculados para trajetória retilínea e parabólica.

	Água + A150	Água + B100	A150 + B100
Reta	75,65	74,42	33,70
Parábola	74,96	52,42	8,79

As simulações realizadas com trajetórias retilíneas e parabólicas revelaram diferenças notáveis na deposição de energia em materiais homogêneos e não-homogêneos, representando as propriedades físicas do freamento e do MCS, como ilustrado nas figuras 10 e 11. Para os fantasmas homogêneos, os resultados mostraram que trajetórias parabólicas resultam em maior perda de energia, especialmente em materiais de maior densidade, como o A150, onde a energia residual foi reduzida de 85,95 MeV para 61,92 MeV. Esse comportamento é relacionado à maior extensão do caminho percorrido pela partícula no material, o que aumenta a probabilidade de interações inelásticas e o freamento devido às colisões com os núcleos atômicos. Os resultados enfatizaram o efeito das transições entre materiais de densidades e números atômicos distintos, como evidenciado na combinação A150 + B100. Nessa configuração, a energia residual foi a menor entre todas as configurações analisadas, alcançando apenas 33,70 MeV para trajetórias retas e 8,79 MeV para parabólicas. Isso ocorre devido às interfaces entre materiais de densidades distintas que intensificam o MCS, desviando a trajetória das partículas e aumentando a deposição de energia localmente. Essas observações destacam a importância de considerar a geometria das trajetórias e a heterogeneidade dos tecidos em cálculos de dose. Em contextos clínicos, como na protonterapia, é possível explorar trajetórias não-lineares para melhorar a precisão na entrega da dose em regiões complexas, como em tumores próximos de estruturas críticas. Além disso, os resultados confirmam que materiais menos densos, como água e B100, apresentam menor poder de freamento, permitindo maior retenção de energia pelas partículas incidentes. Portanto, a análise física das trajetórias revela que trajetórias parabólicas intensificam as interações por causa da maior extensão do trajeto, enquanto materiais heterogêneos amplificam os efeitos de espalhamento e deposição de energia, enfatizando a relevância de trajetórias complexas em modelos computacionais para otimização de tratamentos radioterápicos.

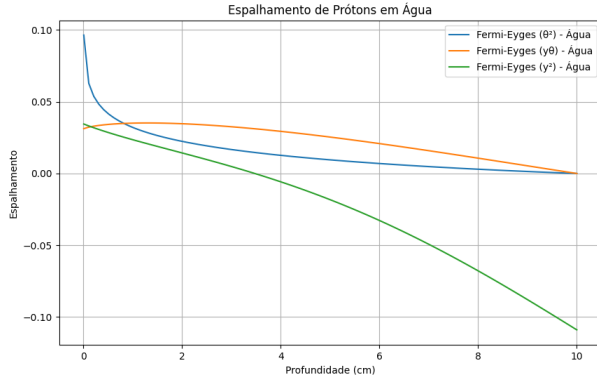


Figura 12: Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em água.

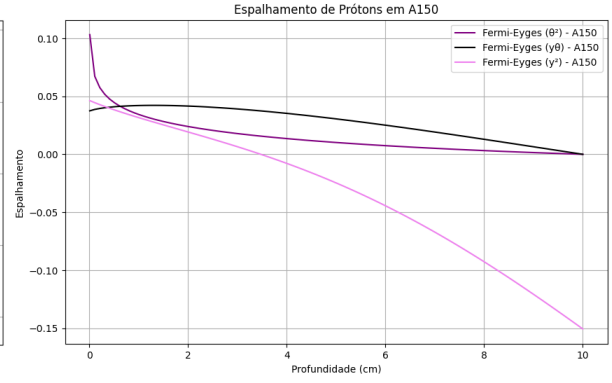


Figura 13: Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em A150

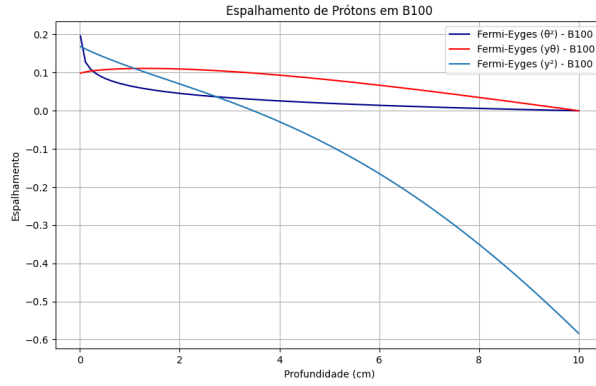


Figura 14: Distribuição angular do espalhamento Molière, utilizando-se da correção de Fermi-Eyges para prótons com energia inicial de 200 MeV em B100

Os gráficos acima apresentam o comportamento do espalhamento de prótons nos materiais citados, baseado no modelo de Fermi-Eyges para parâmetros como θ^2 , y , y^2 .

O gráfico 12 representa o espalhamento em água, onde é possível observar que θ^2 decresce rapidamente com a profundidade inicial. Tal comportamento é consistente com a desaceleração dos prótons e também a diminuição de interações com os átomos do meio. O parâmetro y_θ apresenta uma variação sutil, refletindo nos deslocamentos laterais. Por fim, y decresce linearmente, culminando em colisões sucessivas no desvio lateral.

O gráfico 13 representa os mesmos parâmetros, porém, no material A150, análogo a tecidos moles como músculos. O resultados obtidos foram similares ao da água, embora θ^2 apresente uma queda mais acentuada nas camadas iniciais, por conta da densidade ser maior. θ_y e y^2 refletem essas diferenças, resultando em espalhamentos e deslocamentos acentuados.

O gráfico 14, representa o B100, análogo aos tecidos ósseos. Como possui uma densidade maior que os anteriores, o comportamento de θ^2 é mais uma vez composto por

uma queda inicial pronunciada. Entretanto, y_θ e y^2 mostram ter deslocamentos laterais superiores, por conta da densidade eletrônica elevada, o que aumenta as interações coulombianas, promovendo um maior espalhamento.

Ao se comparar os três materiais, nota-se que materiais com densidade menor, como a água, apresentam um espalhamento lateral menor diferentemente dos materiais com densidade maior, o que ajuda a entender o comportamento do próton na matéria e permite ajustar a profundidade e a lateralidade na entrega da dose.

6 Conclusões

Este trabalho apresentou o desenvolvimento de algoritmos para a previsão de trajetórias de prótons em tratamentos radioterápicos, com ênfase na eficiência computacional. A utilização das teorias fundamentais de Bethe-Bloch e Molière, em conjunto com métodos determinísticos e à interpolação de dados experimentais, possibilitou a modelagem de interações de prótons com os materiais apresentados.

Os resultados mostraram uma convergência geral entre os valores teóricos e os dados do NIST, validando o uso da equação de Bethe-Bloch na descrição do poder de frenagem e na correção de Fermi-Eyges para espalhamento em diferentes materiais. Materiais mais densos tendem a intensificar o espalhamento dos prótons. Além disso, as simulações mostraram que trajetórias mais complexas, como as parabólicas, oferecem uma compreensão detalhada da deposição de energia em fantasmas homogêneos e heterogêneos, destacando o impacto das características dos materiais na interação de prótons.

Finalmente, apesar de os modelos desenvolvidos apresentarem resultados consistentes, algumas limitações foram identificadas, como discrepâncias em energias extremas devido às simplificações teóricas. Recomenda-se que futuros trabalhos explorem correções adicionais, como efeitos nucleares e bremsstrahlung, bem como validem os modelos propostos com dados clínicos reais, ampliando sua aplicabilidade.

Referências

- [1] Instituto Nacional de Câncer (Brasil). *Estimativa 2023: incidência de câncer no Brasil*. Instituto Nacional de Câncer, Rio de Janeiro, 2022. Disponível em: <https://www.inca.gov.br>. Acesso em: dd mmm. yyyy.
- [2] Eric J. Hall and Amato J. Giaccia. *Radiobiology for the Radiologist*. Lippincott Williams & Wilkins (LWW), Philadelphia, PA, 8th edition, 2018. Comprehensive reference in radiobiology for medical and radiation oncology professionals.
- [3] Bernard Gottschalk. Radiotherapy proton interactions in matter. *arXiv preprint arXiv:1804.00022*, 2018.
- [4] Nils Krah, Jean-Michel Létang, and Simon Rit. Polynomial modelling of proton trajectories in homogeneous media for fast most likely path estimation and trajectory simulation. *Physics in Medicine & Biology*, 64(19):195014, 2019.
- [5] Harald Paganetti and Hanne Kooy. Proton radiation in the management of localized cancer. *Expert review of medical devices*, 7(2):275–285, 2010.
- [6] Hélio Yoriyaz. Método de monte carlo: princípios e aplicações em física médica. *Revista Brasileira de Física Médica*, 3(1):141–149, 2009.
- [7] William T Scott. The theory of small-angle multiple scattering of fast charged particles. *Reviews of modern physics*, 35(2):231, 1963.
- [8] Tatsuo Tabata and Rinsuke Ito. An improved interpolation formula for the parameter b in molière’s theory of multiple scattering. *Japanese Journal of Applied Physics*, 15(8):1583–1584, 1976.
- [9] Nobuyuki Kanematsu. Alternative scattering power for gaussian beam model of heavy charged particles. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(23):5056–5062, 2008.
- [10] National Institute of Standards and Technology. National institute of standards and technology. <https://www.nist.gov/>, 2024. Acesso em 20 de novembro de 2023.

A Anexos

Nesta seção, apresentamos os códigos Python desenvolvidos para as simulações realizadas neste trabalho.

A.1 Código para Interpolação de Dados

```
1 import numpy as np
2 from scipy.interpolate import interp1d
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 # Interpolação de dados
6 def interpolar_dados(x, y):
7     return interp1d(x, y, kind='cubic', fill_value='extrapolate')
8
9 # Exemplo de uso
10 x = [10, 20, 30]
11 y = [0.1, 0.2, 0.3]
12 funcao_interp = interpolar_dados(x, y)
13
14 # Gráfico da interpolação
15 plt.plot(x, y, 'o', label='Dados Originais')
16 plt.plot(np.linspace(10, 30, 100), funcao_interp(np.linspace(10,
17     30, 100)), label='Interpolação')
18 plt.legend()
19 plt.show()
```

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Parametros
5 Z = 1 # Numero atomico (exemplo para agua)
6 rho = 1 # Densidade em g/cm
7 I = 75 # Energia media de ionização para agua (em eV)
8
9 # Carregar dados de STP e interpolar
10 caminho_arquivo = '/content/drive/MyDrive/IC/SP/agua.txt'
11 dados = ler_arquivo(caminho_arquivo)
12
13 if dados is not None and dados.shape[1] >= 2:
14     x = dados[:, 0] # Energia
```

```

15     y = dados[:, 1] / 1.00000E+00 # STP normalizado
16     funcao_interp = interpolar_dados(x, y)
17
18     # Função para calcular Bethe-Bloch e imprimir valores
19     y_bethe = []
20     for E in x:
21         dE_dx = bethe_bloch(E, Z, rho, I) * funcao_interp(E)
22         y_bethe.append(dE_dx)
23
24     # Plota Bethe-Bloch se houverem valores calculados
25     if any(y_bethe): # Verifica se há valores não-zero
26         plt.figure(figsize=(10, 6), dpi=90)
27         plt.semilogx(x, y_bethe, label='Bethe-Bloch', color='orange')
28
29         plt.title('Cálculo de Bethe-Bloch para água')
30         plt.xlabel('Energia (MeV)')
31         plt.ylabel('Perda de Energia por Unidade de Comprimento (MeV/cm)')
32         plt.legend()
33         plt.grid(True)
34         plt.show()
35     else:
36         print("Todos os valores de dE/dx são zero ou muito pequenos para aparecer no gráfico.")
37
38 else:
39     print("Erro ao carregar ou interpolar os dados de STP.")

```

