

Antonio Henrique Machado Magalhães

Uso do método de Monte Carlo para
simulação e detecção do espectro de
raios-X gerado em alvo de Molibdênio,
utilizando o Geant4

Botucatu

2009

Antonio Henrique Machado Magalhães

Uso do método de Monte Carlo para
simulação e detecção do espectro de
raios-X gerado com feixes de elétrons
em alvo de Molibdênio, utilizando o
Geant4

Monografia apresentada ao Instituto de Biociências da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de Botucatu, para obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Prof. Dr. Ney Lemke

Botucatu

2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA SEÇÃO TÉCNICA DE AQUISIÇÃO E TRATAMENTO
DA INFORMAÇÃO
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - CAMPUS DE BOTUCATU - UNESP
BIBLIOTECÁRIA RESPONSÁVEL: SELMA MARIA DE JESUS

Magalhães, Antonio Henrique Machado.

Uso do método de Monte Carlo para simulação e detecção do espectro de raios-X gerado com feixes de elétrons em alvo de molibdênio, utilizando o GEANT4 / Antonio Henrique Machado Magalhães. - Botucatu [s.n], 2009.

Trabalho de conclusão (bacharelado – Física médica) – Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências de Botucatu, 2009

Orientador: Ney Lemke

1. Método de Monte Carlo 2. Elétrons 3. Física médica

Palavras-chave: GEANT4; Método de Monte Carlo; Molibdênio; Raios-X

Agradecimentos

Em primeiro lugar ao Senhor, meu Deus que ilumina meu caminho, guia meus passos e mostra sua luz em todos os momentos da minha vida, de modo que nenhum esforço meu seria suficiente sem que esta fosse sua vontade.

Agradeço aos meus pais, Márcio e Deisi por todo o apoio durante toda minha vida e por fornecer as bases que me permitiram chegar aqui, desde o apoio financeiro, moral e familiar, tão importantes na formação do meu caráter, educação e cultura. Também agradeço minha avó paterna Nilza Ehret, onde estive, pelo trabalho e esforço de uma vida, que por fim foi essencial para que meu sonho se tornasse realidade.

À minha namorada Suzana, que é minha companheira em todas as horas e meu refúgio, quem restabelece minhas forças nas horas de hesitação e ainda me dá enormes e extremamente úteis conselhos científicos.

Aos meus amigos e companheiros de lar, que durante quatro anos e meio foram minha família em Botucatu, com quem compartilhei tempos que jamais esquecerei.

Agradeço aos meus professores que em minha graduação, foram fundamentais para que eu conhecesse novos mundos e compartilhasse um pouco do saber científico. Em especial meu Orientador, Ney Lemke, que me mostrou o caminho para fazer as coisas do jeito certo, e dedicou tempo para que este trabalho fosse concluído. Ao Professor Maurício Moralles do Instituto de Pesquisas Energéticas Nucleares, IPEN-USP e ao Doutorando Daniel Bonifácio que me ajudaram em um ponto chave do projeto. À todos que de qualquer forma cruzaram meu caminho e compartilharam comigo a batalha, meu muito obrigado.

*“O Universo é fruto de uma vontade.
Um dia verás que por detrás de todas
essas miríades de estrelas e galáxias,
oculta-se uma intenção*

Jostein Gaarder, “O dia do Curinga”.

Resumo

A enorme demanda de procedimentos envolvendo radiações ionizantes fomentam a necessidade de métodos seguros de experimentação, considerando a periculosidade de seus efeitos biológicos, com consequente risco para o ser humano. A Legislação Brasileira inclusive proíbe experimentos envolvendo esse tipo de radiação em humanos, através da Portaria 453 do Ministério da Saúde que determina que procedimentos dessa natureza obedeçam princípios de justificação, otimização e limitação de dose. Nesta linha, concomitantemente ao avanço da capacidade de processamento computacional disponível, as simulações computacionais ganham importância nessas situações onde a experimentação é procedimento demasiadamente custoso ou inviável. O método de Monte Carlo, fruto do projeto *Manhattan* durante a segunda guerra mundial, é uma poderosa estratégia para simulações em física computacional. Em física médica, esta técnica tem sido extensivamente usada, possuindo aplicações em diagnóstico, tratamento e desenvolvimento de novas abordagens para o tratamento de câncer. O objetivo deste trabalho é simular a produção e detecção de fótons de raios-X para a faixa de energia do radiodiagnóstico, para alvo de molibdênio, utilizando o *software* Geant4. Os tubos de raios-X com alvo dessa natureza são utilizados em radiodiagnóstico, mais especificamente em mamografia ou exame radiográfico da mama, uma das mais utilizadas técnicas de rastreamento de neoplasias mamárias em mulheres. Durante as simulações foram utilizados diferentes modelos para *bremsstrahlung* disponíveis nos modelos físicos para baixas energias, em situações já abordadas pela literatura em versões anteriores do Geant4. Nossos resultados mostram que embora as situações físicas se mostrem qualitativamente adequadas, as comparações quantitativas aos dados analíticos disponíveis demonstram falhas no código do Geant4 para baixas energias.

Palavras-chave: Geant4, Método de Monte Carlo, Molibdênio, Raios-X.

Abstract

The huge demand for procedures involving ionizing radiation promotes the need for safe methods of experimentation considering the danger of their biological effects with consequent risk to humans. Brazilian's legislation prohibits experiments involving this type of radiation in humans through Decree 453 of Ministry of Health with determines that such procedures comply with the principles of justification, optimization and dose limitation. In this line, concurrently with the advancement of available computer processing power, computing simulations have become relevant in those situations where experimental procedures are too cost or impractical. The Monte Carlo method, created along the Manhattan Project during World War II, is a powerful strategy to simulations in computational physics. In medical physics, this technique has been extensively used with applications in diagnostics and cancer treatment. The objective of this work is to simulate the production and detection of X-rays for the energy range of diagnostic radiology, for molybdenum target, using the Geant4 toolkit. X-ray tubes with this kind of target material are used in diagnostic radiology, specifically in mammography, one of the most used techniques for screening of breast cancer in women. During the simulations, we used different models for *bremsstrahlung* available in physical models for low energy, in situations already covered by the literature in earlier versions of Geant4. Our results show that although the physical situations seems qualitatively adequate, quantitative comparisons to available analytical data shows flaws in the code of Geant4 Low Energy source.

Key-words: Geant4, Monte Carlo Method, Molybdenum, X-Rays.

Sumário

	Página
Resumo	5
Abstract	6
1 Justificativa	9
2 Introdução	10
2.1 Introdução ao Geant4	10
2.2 O Código Geant4	10
2.3 Programação Orientada a Objetos	11
2.4 Arquitetura do Geant4	11
2.5 Os modelos físicos do Geant4	12
2.6 O modelo <i>Low Energy</i>	12
2.7 Produção de raios-X em um tubo de raios-X diagnóstico	13
2.8 Processos de geração de raios-X	13
2.9 Variantes na distribuição de energia do espectro de raios-X	14
2.10 Dependência do <i>kVp</i> e <i>mA</i>	14
2.11 O Método de Monte Carlo.	15
2.12 O Método de Monte Carlo e o transporte de radiação	15
2.13 Exame Radiográfico da Mama	16
3 Objetivos	17
4 Materiais e Métodos	18
5 Resultados e discussão	21
6 Conclusões	29
7 Bibliografia	30
A Anexos	32
A.1 Instalação do Geant4 v9.2 no <i>Ubuntu Linux 9.04</i>	32
A.2 Geometrias no <i>DetectorConstruction</i>	34
A.3 Obtendo a energia cinética pela função <i>ProcessHits</i>	34

Lista de Figuras

1	Diagrama das categorias de classes do Geant4. [CERN, 2007b]	12
2	Relação entre intensidade e comprimento de onda com variações de mA e kVp	15
3	Representação do aparato experimental para produção e detecção de raios-X	19
4	Espectro de raios-X sem filtração, com energia de 30 keV	21
5	Espectros de raios-X sem filtração, de 25, 30 e 35 keV	21
6	Espectros de raios-X com diferentes energias	22
7	Espectros de raios-X com diferentes números de interações	23
8	Espectro de raios-X filtrado, de 35 keV	24
9	Imagem obtida do Geant4 para a Simulação com filtros	24
10	Espectros de raios-X filtrados, de 25, 30 e 35 keV	25
11	Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo <i>Tsai</i> com energia de 25 keV	26
12	Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo <i>Tsai</i> com energia de 30 keV	26
13	Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo <i>2BN</i> com energia de 25 keV	27
14	Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo <i>2BN</i> com energia de 30 keV	27
15	Comparação dos resultados para os modelo <i>2BN</i> e <i>Tsai</i>	28

Lista de Tabelas

1	Valores comparativos para as energias de transição do espectro	22
2	Valores comparativos para as energias de transição do espectro filtrado . .	25

1 Justificativa

A enorme demanda de procedimentos envolvendo radiações ionizantes fomentam a necessidade de métodos seguros de experimentação, considerando a periculosidade de seus efeitos biológicos, com consequente risco para o ser humano. A Legislação Brasileira inclusive proíbe experimentos envolvendo esse tipo de radiação em humanos, através da Portaria 453 do Ministério da Saúde que determina que procedimentos dessa natureza obedeçam princípios de justificação, otimização e limitação de dose.

Segundo [Law & Kelton, 1982], o estudo desses sistemas reais pode ser realizado através de simulações utilizando a modelagem matemática para transcrever a experimentação a partir de modelos que, dependendo da aplicação, representem ou demonstrem o sistema real, que pode ser interpretado como uma coleção de itens entre os quais se possa encontrar ou definir alguma relação de funcionalidade.

Com o constante avanço tecnológico e crescimento da capacidade computacional, a simulação tornou-se um termo bastante genérico pois possui grande abrangência em relação aos campos de aplicação e também por conta das inúmeras formas e mecanismos existentes para descrever uma pluralidade de sistemas. Em geral, a simulação traz grandes vantagens para a solução de problemas onde a experimentação é muito custosa ou mesmo inviável, ou quando existem questões deveras complexas para um tratamento analítico.

O método de Monte Carlo é uma poderosa ferramenta para simulações em física computacional. Diversos pesquisadores fazem uso do método de Monte Carlo, especificamente do código Geant4 em física médica, tanto em aplicações em radiodiagnóstico, medicina nuclear e radioterapia [Perl, 2007]. Embora inicialmente proposto para a área de física de altas energias, o código foi estendido para baixas energias e processos eletromagnéticos, através de novos modelos físicos e adaptações. Para o uso em radiodiagnóstico, especificamente aplicado à mamografia, o Geant4 foi validado através de experimentos realizados por diferentes autores, como [Bonifacio, 2007] e [Vidal & Gabriela, 2008], e mostram que a ferramenta pode ser utilizada nesta área, mas ambos esclarecem que mais estudos são necessários.

2 Introdução

2.1 Introdução ao Geant4

O Geant4 (GEometry ANd Tracking 4) é um conjunto de ferramentas (*toolkit*) para simulação da passagem de partículas através da matéria, baseado no Método de Monte Carlo. Possui inúmeras funcionalidades que incluem rastreamento, geometria, modelos físicos e colisões. Os processos físicos oferecidos incluem os eletromagnéticos, hadrônicos e ópticos, um grande número de partículas, materiais e elementos interagindo em uma gama de energias, que podem em alguns casos, iniciar-se em 250 elétron-volts (eV) e estender-se à ordem de *tera-elétron-volts* (TeV).

O conjunto é resultado da colaboração de físicos e engenheiros de software do mundo todo utilizando a engenharia de software e a tecnologia de programação objeto-orientado, baseada na linguagem de programação *C++*. Na definição e implementação dos componentes do software, parâmetros importantes para a simulação foram incluídos, como a geometria do sistema, os materiais envolvidos, as partículas fundamentais de interesse, a geração de partículas primárias e seus eventos, o rastreamento destas partículas através de materiais e campos eletromagnéticos externos, os processos físicos que governam as interações entre partículas, a geração de dados destes eventos e seu armazenamento, a visualização do detector e da trajetória das partículas e seu armazenamento para posterior análise em diferentes níveis de detalhe e refinamento. [S. Agostinelli, 2003]

2.2 O Código Geant4

Os experimentos em física moderna de partículas e nuclear impõem grandes desafios na criação de um software com complexidade e robustez adequada para lidar com as simulações em larga escala, com boa precisão e que inclua e descreva os detectores utilizados nesses experimentos. Os níveis destes desafios são regidos pela escala de tamanho, complexidade e sensibilidade dos detectores envolvidos e são limitados pela disponibilidade de sistemas computacionais de médio custo, mas com boa capacidade de processamento. Assim, quanto maior o poder de processamento do sistema, maior a complexidade viável de aplicações.

Considerando suas funcionalidades pode-se supor aplicações para o Geant4 em uma enorme variedade de temas, desde estudos simples acerca de fenômenos básicos envolvendo simples geometrias, até detectores com alta complexidade como aqueles utilizados no *Large Hadron Collider* (LHC) e outros. [S. Agostinelli, 2003]

2.3 Programação Orientada a Objetos

O nível de complexidade que os sistemas computacionais podem atingir hoje, exigem uma nova abordagem em termos de programação para operá-los. Segundo [Hickson, 2002], é extremamente difícil administrar um código fonte muito complexo baseado em programação estruturada, o que limita o software quando programado em termos de funções em um mesmo código fonte. Na visão objeto-orientada, o domínio do problema é caracterizado por objetos discretos e individuais que contêm informações, propriedades e comportamentos (métodos) específicos e que se comunicam através de rotinas. O que torna possível sistemas de maior complexidade é o grau de abstração que esses objetos dão ao código, necessitando apenas de informações essenciais de cada objeto, de acordo com a perspectiva do observador, baseando-se em relações hierárquicas. [Booch, 1993]. Outra característica importante é a capacidade de representar o sistema real de forma que os objetos ocultem, ou encapsulem a informação, seja ela dados ou funções que lidam com estes dados, para que o programador possa se concentrar nos aspectos principais de um problema.

Objetos que possuem mesmos atributos e métodos são organizados em classes. Objetos de uma mesma classe relacionam-se da mesma forma com outros objetos do sistema. A orientação a objetos é basicamente uma atividade de definição de classes [Bonifacio, 2007].

Portanto, quando se desenvolve um sistema baseado na orientação a objetos, organiza-se uma estrutura de objetos que armazenam dados e funções. Esta definição, segundo [COPSTEIN, 1997] é coerente com a idéia de que modelos de simulação podem ser vistos como um conjunto de entidades que interagem entre si. Assim, pode-se compreender a escolha de um projeto de software de simulação baseado em programação objeto-orientada, por ser este, um caminho natural para modelos de simulação.

2.4 Arquitetura do Geant4

Como uma boa ferramenta baseada em programação orientada a objetos, o Geant4 possui classes de objetos que se relacionam e o diagrama de classes abaixo é uma representação bastante útil acerca da funcionalidade do código Geant4. Uma definição mais completa do que significam essas classes e como se relacionam, podem ser encontradas no manual do Geant4. Para entender o diagrama, cada caixa na Figura 1 representa uma categoria de classe. As linhas representam uma relação de uso, onde as classes com círculo na extremidade usam a categoria na outra extremidade. A classe *Material*, por exemplo, é utilizada pelas classes *Geometry* e *Particle* [CERN, 2007b].

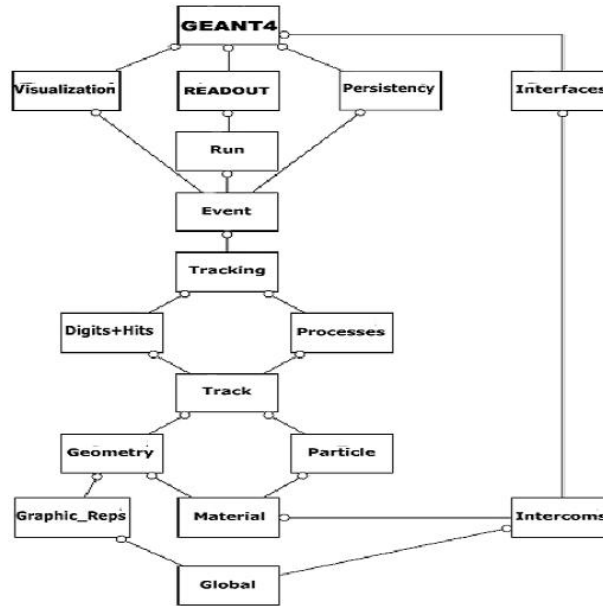


Figura 1: Diagrama das categorias de classes do Geant4. [CERN, 2007b]

2.5 Os modelos físicos do Geant4

O Geant4 abrange uma grande variedade de processos físicos eletromagnéticos, que permitem trabalhar com pósitrons, elétrons, fótons, entre outras [CERN, 2007c]. Para as partículas de nosso interesse (elétrons e fótons), há três modelos a serem empregados, são eles: *Standard*, *Low Energy* e *PENELOPE*, que são baseados em modelos teóricos e utilizam diferentes algoritmos de amostragem e valores de seção de choque.

2.6 O modelo *Low Energy*

O modelo *Low Energy* foi adicionado ao Geant4 para ampliar a validade das interações das partículas e processos, para faixas de energias menores (250 eV à 100 GeV) que os processos existentes no modelo *Standard*. Abrange valores de seção de choque para elementos cujo número atômico esteja entre 1 e 99. Estão inclusos no modelo *Low Energy* os seguintes processos: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, espalhamento Rayleigh, conversão gama (produção de pares), *bremsstrahlung* e ionização.

Para o efeito de *bremsstrahlung*, o Geant4 possui 3 modelos com distribuições angulares diferentes. *Tsai*, *2BN* e *2BS*. O modelo *Low Energy* usa o modelo *Tsai* como padrão, mas segundo [CERN, 2007a] o modelo *2BN* pode ser mais adequado para simulações cuja energia não passe de 100 keV.

2.7 Produção de raios-X em um tubo de raios-X diagnóstico

Raios-X são produzidos por conversão de energia quando elétrons que se movem rapidamente, são subitamente desacelerados no alvo anódico do tubo de raios-X. Esses elétrons são produzidos por emissão termoiônica (emissão de elétrons resultante da absorção de energia térmica) no filamento do cátodo, que para suportar altas temperaturas, é constituído de materiais como o tungstênio, escolhido por conta do alto ponto de fusão (3370°C) e relativa vida útil [Murry *et al.*, 1990].

Os elétrons emitidos termoiônica pelo filamento do cátodo são acelerados em direção ao ânodo por uma diferença de potencial aplicada entre eles. Os elétrons acelerados formam a corrente do tubo, medida em miliamperes, se refere portanto, ao número de elétrons fluindo por segundo, do filamento ao alvo. Durante todo o tempo de aplicação do potencial no tubo o alvo é bombardeado por elétrons provenientes do cátodo e a proporção destes que produzem raios-X é de cerca de 1%. Os outros 99% da energia é dissipado em forma de energia térmica.

O alvo do tubo de raios-X é normalmente constituído de tungstênio, pelo seu alto ponto de fusão e número atômico (74), que torna a produção de raios-X mais eficiente. Em tubos de mamógrafos, no entanto, o alvo é constituído de molibdênio ($Z = 42$). Para entender a diferença na escolha dos materiais do alvo é preciso compreender os processos físicos envolvidos na geração dos raios-X.

2.8 Processos de geração de raios-X

Quando os elétrons provenientes do cátodo encontram o alvo, podem interagir com o núcleo dos átomos do alvo ou com os elétrons que o orbitam. Quando interagem com um elétron do alvo, podem retirá-lo de sua órbita (ionização), fazendo com que um elétron de uma órbita mais externa seja transferido para esta. A transição do elétron de uma órbita mais energética para outra menos energética é acompanhada da emissão de um fóton, cuja energia é dada pela diferença de energia dos níveis de energia atômicos envolvidos na transição. Este processo é denominado Radiação Característica, uma vez que a energia dos fótons liberados depende da energia dos níveis de transição do átomo.

Outra possibilidade é a interação dos elétrons do cátodo com o núcleo dos átomos do alvo. Por conta das interações coulombianas os elétrons são desacelerados e a energia cinética perdida é compensada com a emissão de raios-X. Este processo é denominado *Bremsstrahlung* ou radiação de freamento, e considerando as variações nos parâmetros que envolvem a dinâmica da interação entre os elétrons e átomos do alvo (como a energia cinética com que os elétrons atingem o alvo), é de se esperar que haja um amplo espectro de radiação com diferentes comprimentos de onda e, portanto, energias. A eficiência na produção de raios-X e quantidade de radiação de freamento é maior quanto maior for o

número atômico dos átomos do alvo [Murry *et al.*, 1990]. Assim, um alvo de tungstênio produz muito mais radiação por *bremsstrahlung* do que um alvo de molibdênio, e neste a radiação característica possui grande importância no total de radiação emitida. Com o molibdênio, a radiação característica emitida é de menor energia (entre 17,5 e 19,6 keV para camada $K\alpha$ e $K\beta$, respectivamente) em relação ao tungstênio (entre 57 e 69 keV), fato de muito interesse para os exames radiográficos da mama, pois o contraste em tecidos de baixa densidade depende de fótons característicos de baixa energia [Sprawls, 1987].

2.9 Variantes na distribuição de energia do espectro de raios-X

Determinados fatores alteram a distribuição do espectro de raios-X. A tensão aplicada no tubo, por exemplo, é responsável por acelerar os elétrons em direção ao alvo. Variações nessa tensão influenciam a energia dos elétrons e consequentemente dos fótons de raios-X produzidos. Esta variação pode ser quantificada pelo fator de *ripple*, porcentagem de variação da tensão de pico aplicada no tubo [Johns & Cunningham, 1969]. O ângulo do ânodo também influencia o espectro, pois é responsável pelo efeito Heel ou efeito anódico. Este ocorre porque os elétrons atravessam diferentes profundidades no alvo (ânodo), por conta do ângulo de inclinação, consequentemente sofrendo atenuações diferentes.

O uso de filtros também alteram o espectro, pois removem fótons de baixa energia e atenuam a alta energia, aumentando a energia média do feixe de raios-X (além de diminuir a dose no paciente). filtração pode ser definida como o processo em que o feixe de raio-X é modelado de forma a aumentar a quantidade de fótons úteis à formação de imagem.. Há diferentes níveis de filtração, não relacionados ao paciente, a se considerar em radiologia. A filtração inerente, por exemplo, é resultado da absorção de raios-X pelo próprio tubo quando esses o atravessam. É medida em equivalentes de alumínio, que representam a espessura de alumínio que produzirão o mesmo grau de atenuação que os materiais do tubo, geralmente varia entre 0,5 e 1,0 mm de alumínio equivalente. [Murry *et al.*, 1990]. Além da filtração inerente, há ainda a filtração adicional, obtida através de placas de materiais absorvedores. Em mamografia, por exemplo, é comum a utilização de filtros de molibdênio, ou outros materiais (como o ródio), para atenuar a radiação produzida por *bremsstrahlung* com energia acima de 20 keV, que reduzem o contraste da imagem. [Murry *et al.*, 1990].

2.10 Dependência do kVp e mA

A quilovoltagem de pico determina a energia máxima dos fótons de raios-X produzidos e sua quantidade. No entanto, o número de fótons produzidos está mais diretamente ligado ao número de elétrons que atingem o alvo do que propriamente a quilovoltagem de pico. Assim, a corrente elétrica do tubo (mA), quando aumentada, promove aumento efetivo na

intensidade dos fótons gerados, sem contudo alterar sua energia. Podemos estimar uma relação entre kVp e mA onde a produção de fótons está ligada a estas grandezas de forma:

$$mA = kVp^2 \quad (1)$$

A Figura 2 de [Murry *et al.*, 1990] corrobora o conceito:

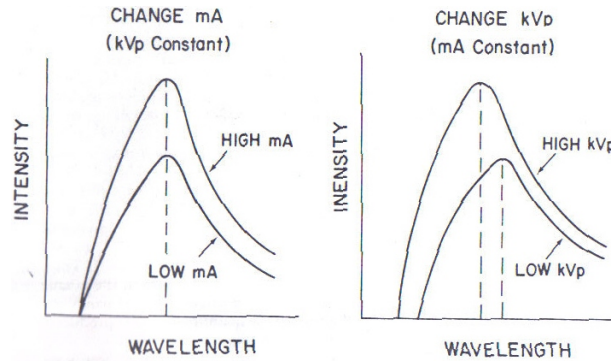


Figura 2: Relação entre intensidade e comprimento de onda com variações de mA e kVp

2.11 O Método de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo é uma alternativa estatística que utiliza sequências numéricas aleatórias para simular o comportamento de sistemas matemáticos, físicos e biológicos, desde que possam ser descritos através de amostras aleatórias de funções de densidade de probabilidade (*PDF's*). Segundo [Bonifacio, 2007], o método pode ser bastante útil em simulações computacionais envolvendo processos físicos como a interação da radiação com a matéria.

2.12 O Método de Monte Carlo e o transporte de radiação

Simular o transporte de radiação utilizando o método de Monte Carlo é contar uma história sobre a partícula, definindo as sequências de caminho que percorre e os eventos de interação que a mesma pode sofrer, que resultam em alterações de trajetória, perda de energia ou geração de partículas secundárias. Para compor essa história numérica, deve-se basear o sistema real em modelos de interações, por sua vez baseados nas seções de choque diferenciais dos mecanismos que se deseja incluir na simulação. São as seções de choque que definem as funções de densidade de probabilidade que caracterizam a trajetória, como o Livre Caminho entre as interações, tipo de interações, perda de energia e deflexão angular em um determinado evento e o estado inicial das partículas secundárias,

caso haja alguma. Assim, através das funções de densidade de probabilidade é possível, a partir de amostragem, reconstruir a história da partícula. Vale lembrar que estas histórias carregam consigo incertezas estatísticas que podem ser reduzidas aumentando-se o número de simulações.

2.13 Exame Radiográfico da Mama

O câncer de mama é o segundo tipo de câncer mais frequente no mundo e o mais comum em mulheres. A cada ano, 22 por cento dos novos casos de câncer em mulheres são de mama [Inca, 2006]. A principal estratégia de rastreamento populacional ao câncer de mama no Brasil, recomendado pelo Ministério da Saúde, é o exame mamográfico, a partir dos 40 anos de idade. Segundo [Inca, 2007], a mamografia tem sensibilidade (capacidade de detectar verdadeiros positivos) entre 88 e 93,1 por cento e especificidade (capacidade de detectar verdadeiros negativos) entre 85 e 94,2 por cento. Com essas taxas, estima-se que a utilização desse método de rastreamento diminua a mortalidade em 25 por cento. Recentemente, o Presidente da República sancionou a lei 11.664 de 29 de Abril de 2008 que garante acesso gratuito ao exame mamográfico para mulheres a partir dos 40 anos. Nos exames radiográficos, como o da mama, o físico médico possui importância fundamental para o correto diagnóstico e segurança do paciente, pois atua no controle de qualidade e dosimetria dos equipamentos. Este profissional possui conhecimentos necessários para avaliar parâmetros de precisão, exatidão, qualidade do feixe, entre outros, além de compreender os processos físicos envolvidos na utilização da radiação em diagnóstico médico.

3 Objetivos

- Criar um protocolo, em português, para a instalação do Geant4 versão 9.2 em sistemas *LINUX*.
- Construção do aparato para produção e detecção de raios-X em alvos de molibdênio, para faixas de energia utilizadas em radiodiagnóstico (25, 30 e 35 keV).
- Comparar os resultados obtidos com a literatura e realizar análises qualitativas do comportamento do espectro gerado quando da alteração de parâmetros físicos como kVp e mA .

4 Materiais e Métodos

O início deste trabalho abrange a criação de um protocolo que seja norte para futuras instalações da ferramenta. Hoje há diversos materiais disponíveis na internet que demandam uma busca dispendiosa para o usuário que deseja implantar o sistema Geant4. Durante a primeira instalação da ferramenta, ocorreu a necessidade de compilar a enorme quantidade de material disponível para torná-lo objetivo e didático, pois por vezes, durante a instalação encontrou-se divergências e incompletude nas explicações desses textos. A intenção então, foi usar a experiência adquirida desta e das futuras instalações do Geant4 e dos textos e artigos lidos, para escrever um material guia, mais simples para elucidar sua instalação e utilização. O manual de instalação criado consta no apêndice deste trabalho.

Para a simulação da produção e detecção de raios-X, utilizaremos o modelo físico *Low Energy*, também chamado de modelo *Livermore*, pois abrange energias entre 250 eV e 1 GeV, faixa adequada para as energias utilizadas em radiodiagnóstico. Os processos físicos eletromagnéticos disponíveis no modelo *Low Energy* que utilizaremos, para fótons, são espalhamento Rayleigh, espalhamento Compton e efeito fotoelétrico, e para elétrons, *bremsstrahlung* (modelo 2BN), ionização e espalhamento múltiplo. O critério para a definição dos processos está em conformidade com as simulações realizadas por [Bonifacio, 2007] e [Miceli *et al.*, 2007]. O modelo *Standard* seria uma alternativa, com tempo de processamento menor, mas este modelo considera o núcleo do átomo fixo, portanto não abrange o espalhamento coerente. Utilizaremos os modelos *Tsai* e *2BN* nas simulações e faremos uma comparação entre ambos.

O aparato geométrico derivado da classe *G4VDetectorConstruction* inclui o alvo de molibdênio, com um ângulo de 17° e filtros de berílio (0,5 mm), alumínio (0,5 mm) e molibdênio (0,03 mm). Para tal configuração temos na literatura os espectros simulados por [Bonifacio, 2007] com o Geant4 versão 7.1 (os dados foram gentilmente cedidos pelo autor) e calculado por [Cranley *et al.*, 1997]. A Figura 3 representa o aparato que montaremos:

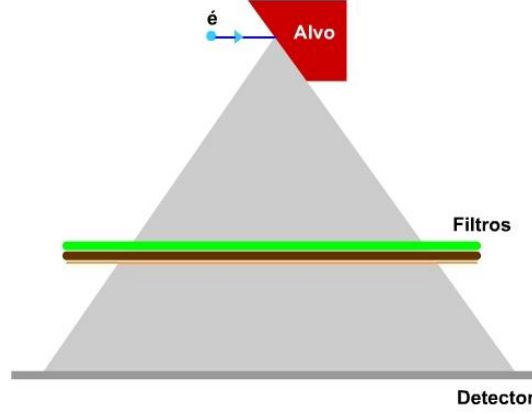


Figura 3: Representação do aparato experimental para produção e detecção de raios-X

Para a definição da energia dos elétrons, utilizaremos o modelo utilizado por [Bonifacio, 2007], considerando o mamógrafo um equipamento de potencial constante e portanto com fator de ripple (Fr) igual à zero,

$$kV = kV_p \left[1 - \frac{Fr}{100} (1 - |\sin(2\pi x)|) \right] \quad (2)$$

Onde x é um numero aleatório entre zero e um segundo distribuição uniforme e kV_p a quilo-voltagem máxima do tubo de raios-X. Utilizaremos 25, 30 e 35 kV para quilo-voltagem de pico. Assim a energia do elétron primário, gerado pelo Geant4 na classe derivada *G4VPrimaryGeneratorAction* será dada pelo valor obtido de $kV(x)$ multiplicado pela carga fundamental do elétron em elétron-volts. O comprimento do filamento do cátodo não será simulado.

Será simulado primeiramente o espectro de raios-X sem filtração. Os dados obtidos neste processo serão utilizados como “dados de entrada” para a segunda parte da simulação, adicionando os filtros para obtenção do espectro filtrado. Tal procedimento justifica-se pela eficiência do processo, uma vez que a produção de fótons de raios-X por elétron no alvo é baixa e demanda muito tempo computacional, com muitas interações. Obtidos os dados do espectro não filtrado, podemos utilizar funções do Geant4 para criar uma distribuição aleatória dos valores de energia contidos no espectro simulado, elevando a eficiência do processo, pois toda partícula gerada será fóton com energia dentro do espectro, com as respectivas probabilidades de ocorrência.

Para detecção do espectro de raios-X foram obtidos histogramas relativos à energia cinética dos fótons que atravessavam determinado volume semi-esférico e tais valores armazenados em canais de contagem de energia com 0.2 keV cada. Fótons cuja energia

compreendia o intervalo energético de cada canal eram contados como pertencentes ao canal posterior (ex: foton com 0.1 keV era contado no canal de 0.2 keV).

Para comparação com os dados da literatura foi preciso normalizar os espectros filtrados de 25 e 30 keV pela área da curva. Utilizando o *software OpenOffice Calc*, calculamos pelo método do trapézio a área abaixo da curva e normalizamos o espectro.

5 Resultados e discussão

Para a primeira etapa da simulação temos abaixo a Figura 4 que contém o espectro de raios-X sem filtração obtido com aproximadamente 10^9 elétrons interagindo no alvo de molibdênio para energia 30 keV de energia, a Figura 5 com os espectros de energia de 25, 30 e 35 keV para comparação e na Figura 7 o mesmo espectro para 30 keV, mas com $2 \cdot 10^8$ e 10^9 elétrons.

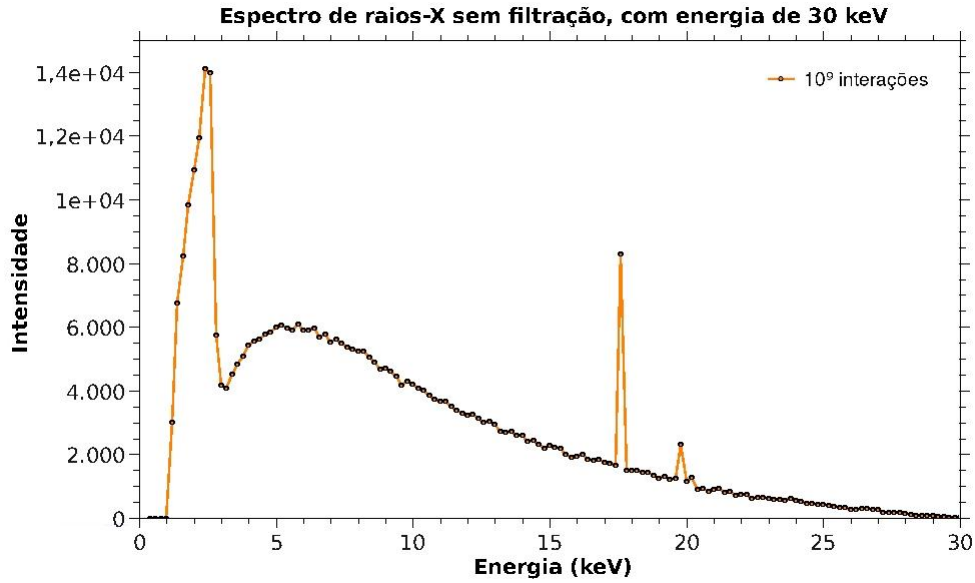


Figura 4: Espectro de raios-X sem filtração, com energia de 30 keV

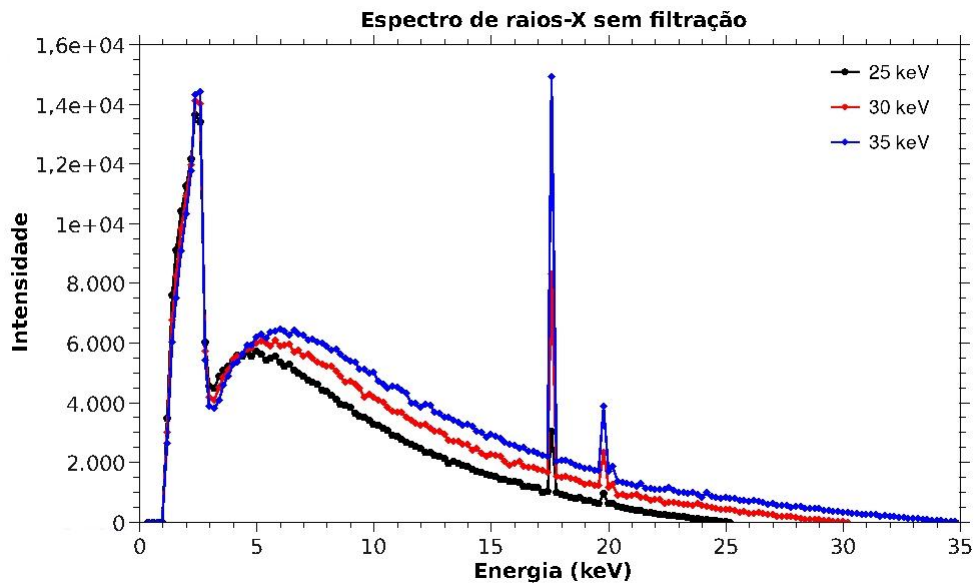


Figura 5: Espectros de raios-X sem filtração, de 25, 30 e 35 keV

É possível observar os picos de intensidade correspondentes à produção de radiação característica nas camadas L , $K\alpha$ e $K\beta$, uma vez que não há filtração e portanto, permanência de fótons de baixa energia. De posse desses dados avaliamos a concordância dos valores de energia de transição teóricos de [R.D. Deslattes & R.A. Dragoset, 2009] e experimentais calculados através das médias das energias de pico medidas para 25, 30 e 35 keV das camadas L , $K\alpha$ e $K\beta$ através da Tabela 1:

Tabela 1: Valores comparativos para as energias de transição do espectro

Camadas	Teórico (keV)	Experimental (keV)	Erro (%)
L-Shell	2,454	2,460	0,24
$K\alpha$ -Shell	17,50	17,65	0,85
$K\beta$ -Shell	19,60	19,65	0,25

Através de comparações dos espectros experimentais, fazemos uma interessante análise qualitativa no que tange a influência da tensão de pico (kVp) e corrente no tubo (mA). Na Figura 6, temos a comparação entre dois espectros não filtrados, produzidos a partir de feixe de elétrons com energia de 25 e 35 keV. No caso, estas energias representam diferentes tensões no tubo de raios-X. Fisicamente, quando esta grandeza sofre aumento, a energia máxima do feixe é deslocada para um valor maior por conta da maior energia cinética dos elétrons que colidem no alvo.

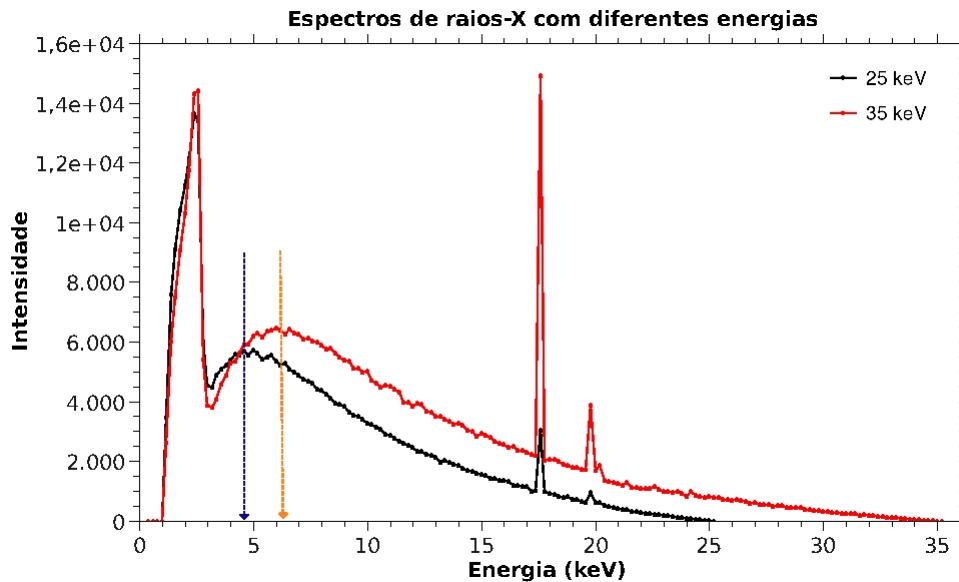


Figura 6: Espectros de raios-X com diferentes energias

Outra importante análise é quanto às variações da corrente do tubo (mA). Considerando que variações nesta grandeza acarretam quantidades diferentes de elétrons colidindo

no alvo, simulamos este efeito simplesmente variando o número de partículas geradas pelo *PrimaryGeneratorAction*. Na figura 7 é possível perceber que a miliamperagem é diretamente proporcional à intensidade do espectro. No entanto, a energia máxima não se altera. Detalhe para os picos de radiação característica, que não se alteram nem com a energia, nem com a intensidade, pois como dito anteriormente, é tão somente característica do elemento alvo (molibdênio).

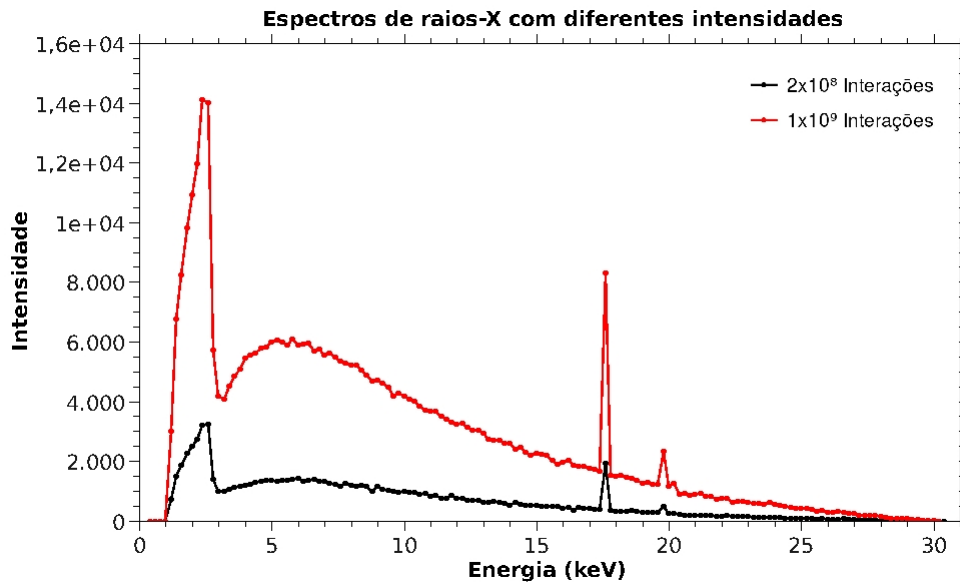


Figura 7: Espectros de raios-X com diferentes números de interações

A segunda etapa da simulação consistiu em usar os dados do espectro não filtrado para gerar aleatoriamente fótons com distribuição de energia ponderada pelas intensidades. Essas novas partículas passavam por três filtros (Be 0,5 mm, Al 0,5 mm, Mo 0,03 mm) antes de passarem pelo detector. A Figura 8 representa um dos espectros obtidos e a Figura 9 uma representação da simulação realizada.

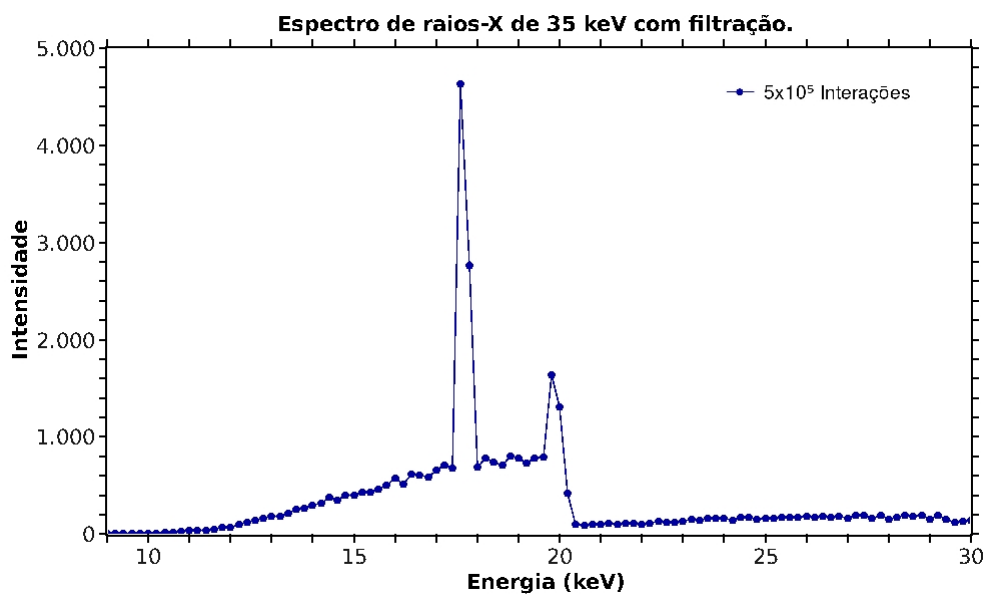


Figura 8: Espectro de raios-X filtrado, de 35 keV

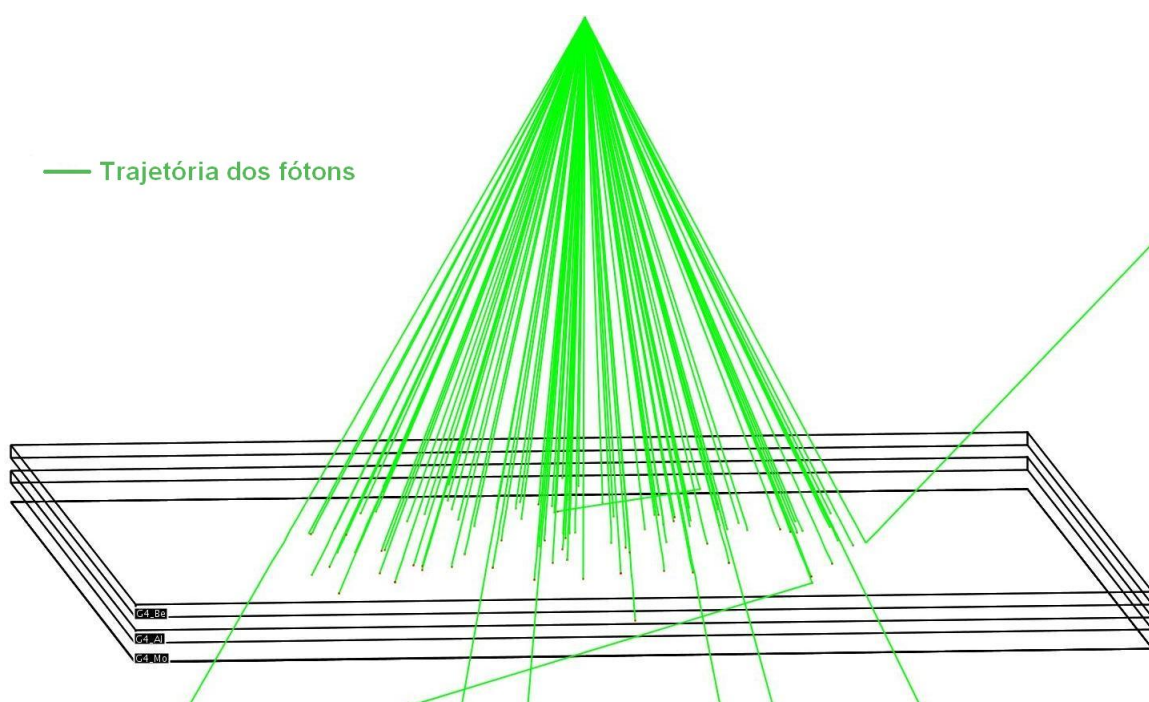


Figura 9: Imagem obtida do Geant4 para a Simulação com filtros

É possível observar a remoção dos fótons de baixa e alta energia. Na Figura 10 temos os espectros filtrados para as três energias estudadas.

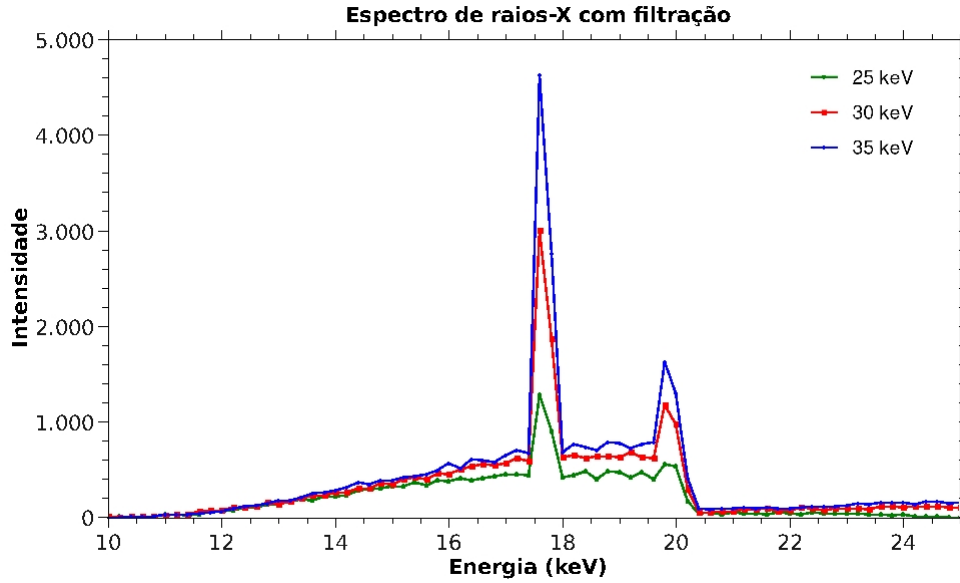


Figura 10: Espectros de raios-X filtrados, de 25, 30 e 35 keV

Para verificar a concordância dos valores teóricos e experimentais dos picos de emissão característica, utilizamos como base os valores da Tabela 1 e assim construímos a Tabela 2 para os espectros filtrados:

Tabela 2: Valores comparativos para as energias de transição do espectro filtrado

Camadas	Teórico (keV)	Experimental (keV)	Erro (%)
L-Shell	-	-	-
$K\alpha$ -Shell	17,50	17,60	0,56
$K\beta$ -Shell	19,60	19,8	1,00

Para as comparações dos espectros filtrados com os calculados de [Cranley *et al.*, 1997], foi preciso normalizar as intensidades das curvas simuladas pela área das mesmas. As Figuras 11 e 12 trazem os gráficos comparativos para o modelo *Tsai* com energia de 25 e 30 keV, respectivamente e as Figuras 13 e 14 as mesmas comparações para o modelo *2BN*.

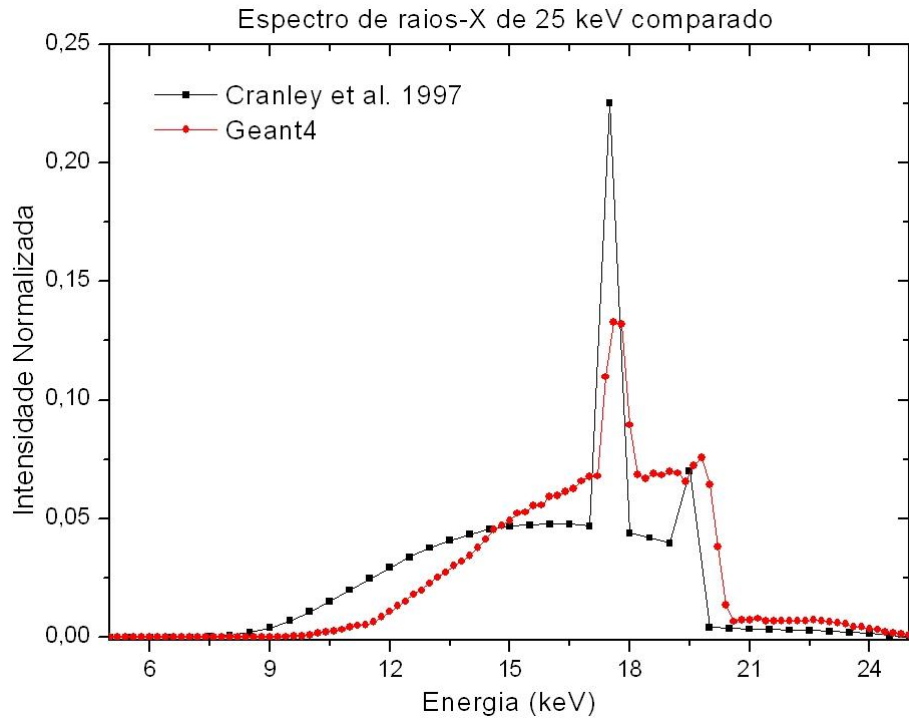


Figura 11: Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo *Tsai* com energia de 25 keV

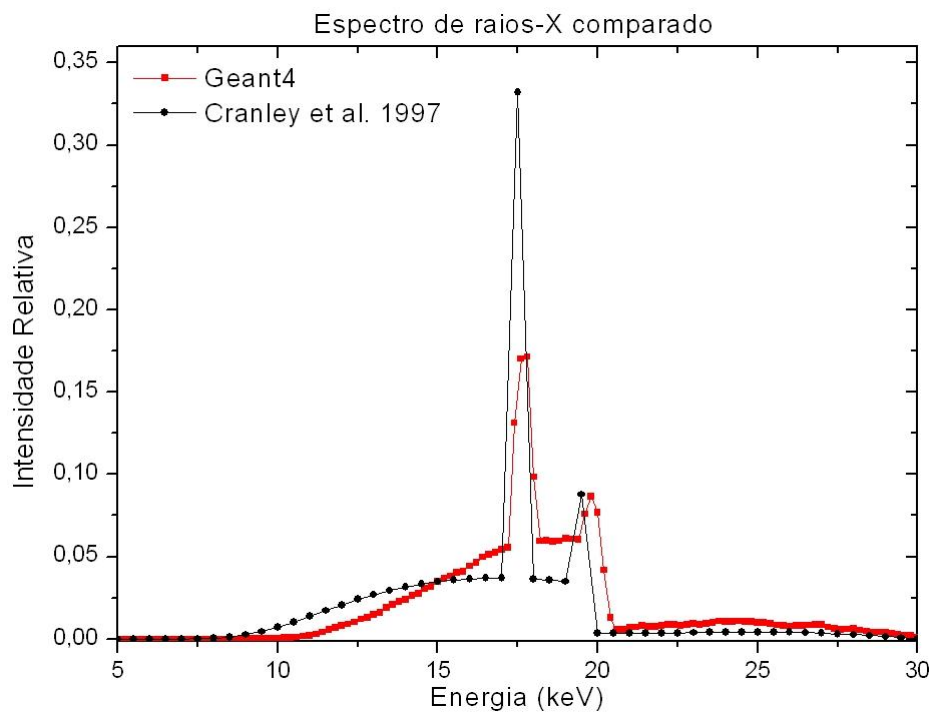


Figura 12: Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo *Tsai* com energia de 30 keV

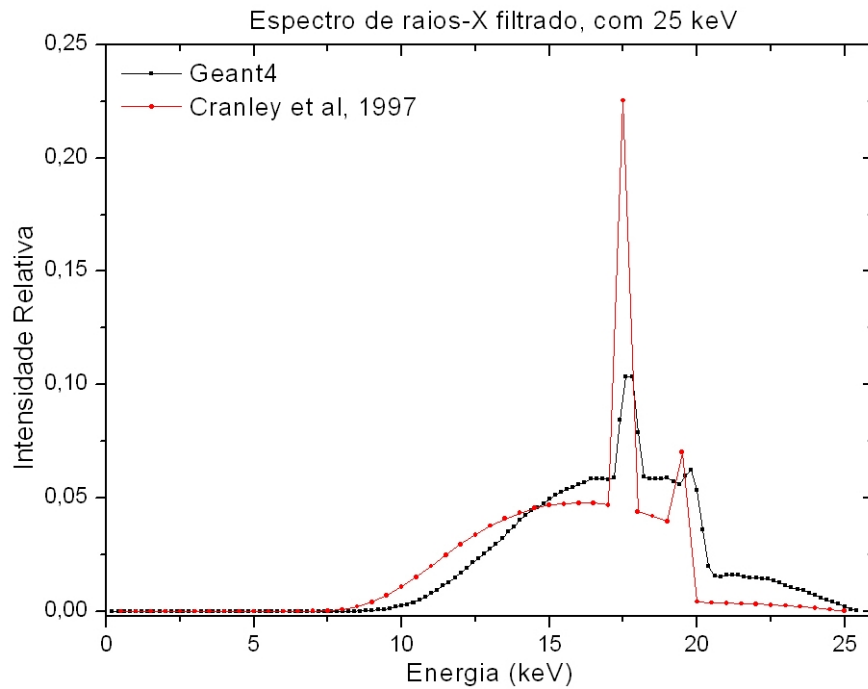


Figura 13: Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo $2BN$ com energia de 25 keV

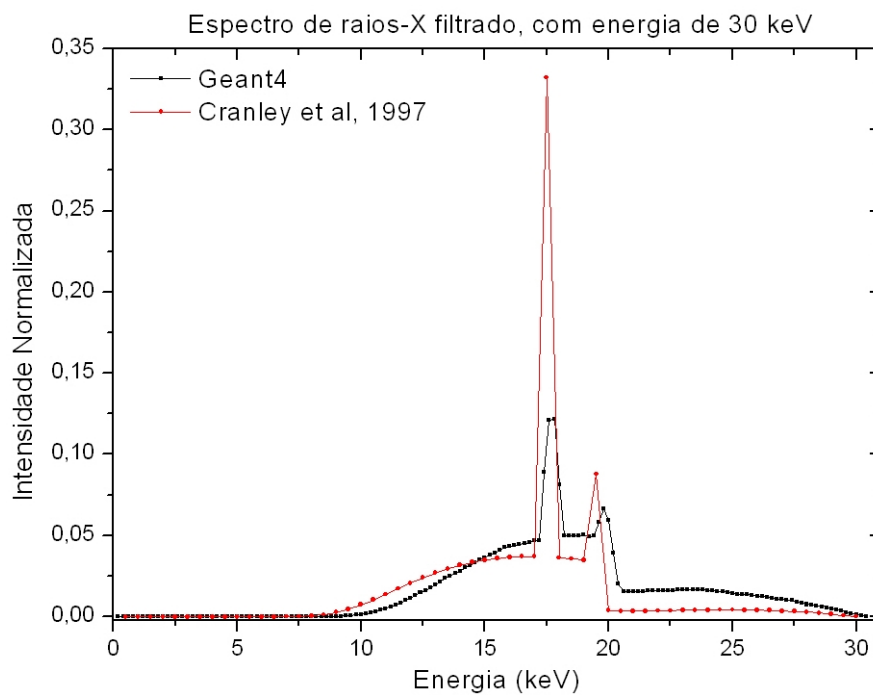


Figura 14: Comparação dos modelos teórico e experimental para o modelo $2BN$ com energia de 30 keV

É preciso considerar que o modelo teórico de [Cranley *et al.*, 1997] passou por métodos de redução de variância, o que não ocorre com nosso espectro. não houve divergência

significativa entre os modelos *Tsai* e *2BN* para *bremsstrahlung* (Figura 15), embora os resultados se mostrem um pouco mais coerentes para a porção do espectro onde predomina o *bremsstrahlung*, é possível perceber que no espectro simulado a atenuação deste efeito foi maior. Ocorrem ainda divergências no pico de emissão de radiação característica, o que pode indicar que existem incoerências nas funções de probabilidades que determinam a ocorrência de *bremsstrahlung* versus radiação característica no código do Geant4. O problema já é conhecido e apontado na literatura por [Bonifacio, 2007].

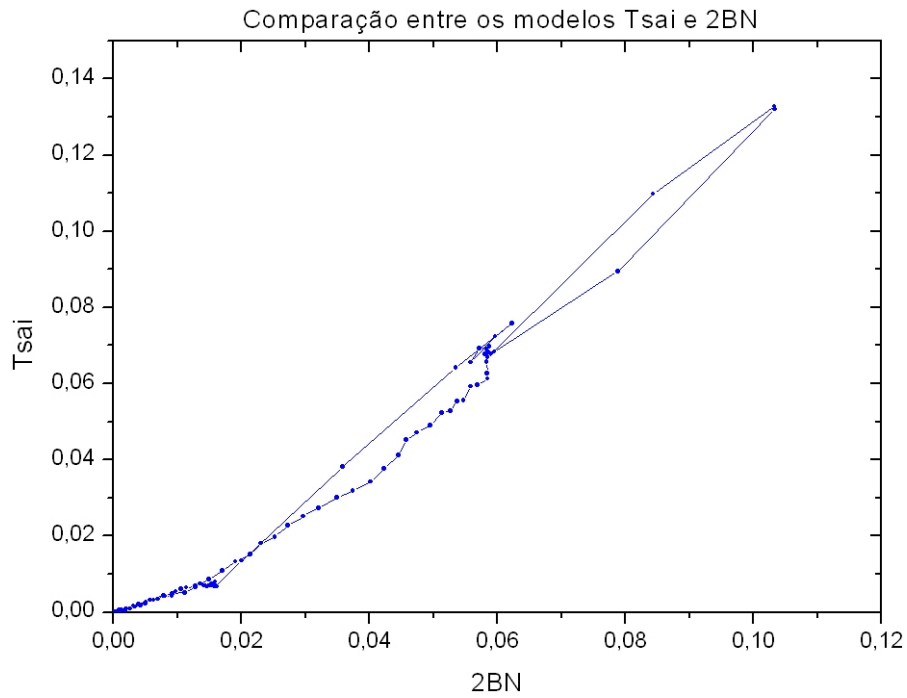


Figura 15: Comparação dos resultados para os modelo *2BN* e *Tsai*

6 Conclusões

O Geant4 é muito útil em simulações da interação da radiação com a matéria, utilizando o método de Monte Carlo, embora não seja uma ferramenta de fácil entendimento. O código baseado em programação orientada a objetos (C++) paradoxalmente dificulta e facilita seu manuseio. Dificulta, porque compreender a lógica e a alta abstração dos objetos é tarefa árdua, mas facilita, uma vez que a enorme quantidade de processos e parâmetros disponíveis no Geant4 é melhor compreendida quando trabalhada sob as propriedades de classe, hierarquização, encapsulamento e outras possibilidades do paradigma da orientação a objetos.

A ferramenta possui ainda outras vantagens, como o código aberto e a gratuidade. Traz ainda um fórum de discussões muito informativo. Por várias vezes precisamos pedir ajuda em nossas simulações e sempre que recorremos ao fórum tivemos respostas rápidas e precisas em menos de 24 horas.

No que tange a simulação e detecção do espectro de raios-X, temos boa coerência com a literatura. Observamos que a partir da variação das condições de simulação, como nas variações de energia e número de interações, os resultados acompanham o esperado pela teoria, o que denota que o código realmente é capaz de simular situações físicas. No entanto há problemas específicos nesse tipo de simulação que atrapalham a precisão dos resultados quando comparados com valores analíticos.

Portanto é preciso mais estudos e aprimoramento do código do Geant4 para simulações envolvendo produção de raios-X em alvos de molibdênio à baixas energias. Segundo a literatura, o problema não ocorre em outras situações como nos alvos de tungstênio e energias mais altas (70 keV por exemplo). É possível que nas próximas versões do programa, que saem a cada seis meses, o problema seja resolvido ou que haja mais explicações dos desenvolvedores do código sobre como lidar com a questão.

Em relação aos objetivos das simulações computacionais, o Geant4 cumpre bem seu papel, pois permite inúmeras possibilidades de configurações, materiais, energias e geometrias. Pode por exemplo, auxiliar no desenvolvimento de novos filtros, no estudo de novos materiais e o comportamento do espectro de raios-X em condições adversas de ambiente.

7 Bibliografia

Referências

- [Bonifacio, 2007] Bonifacio, Daniel Alexandre Baptista. 2007 (Apr. 20). *Validação do Geant4 para a produção e detecção de raios X na faixa de energia de radiodiagnóstico*.
- [Booch, 1993] Booch, G. 1993. *Object-Oriented Analysis and Design with Applications*. Addison Wesley.
- [CERN, 2007a] CERN. 2007a. *Geant4 Physics Reference Manual*.
- [CERN, 2007b] CERN. 2007b. *Geant4 Software Reference Manual*.
- [CERN, 2007c] CERN. 2007c. *Geant4 User's Guide*.
- [COPSTEIN, 1997] COPSTEIN, B. 1997. SIMOO: Plataforma Orientada a Objetos para Simulação Discreta Multi. *Paradigma*, **137**.
- [Cranley *et al.*, 1997] Cranley, K., Gilmore, BJ, Fogarty, GWA, & Desponds, L. 1997. Catalogue of diagnostic x-ray spectra and other data. *IPEM Report*, **78**.
- [Hickson, 2002] Hickson, R. 2002. Aprenda a programar em C, C++ e C#. *Rio de Janeiro: Editora Campus*.
- [Inca, 2006] Inca, Instituto Nacional do Câncer. 2006. *Incidência de Câncer no Brasil*.
- [Inca, 2007] Inca, Instituto Nacional do Câncer. 2007. *Mamografia, da prática ao controle*.
- [Johns & Cunningham, 1969] Johns, H.E., & Cunningham, J.R. 1969. *The physics of radiology*. Thomas Springfield, IL.
- [Law & Kelton, 1982] Law, A. M., & Kelton, D. W. 1982. *Simulation modeling and analysis*. McGraw-Hill, New York.
- [Miceli *et al.*, 2007] Miceli, A., Thierry, R., Bettuzzi, M., Flisch, A., Hofmann, J., Senhauser, U., & Casali, F. 2007. Comparison of simulated and measured spectra of an industrial 450kV X-ray tube. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A*, **580**(1), 123–126.
- [Murry *et al.*, 1990] Murry, R.C., Dowdey, J.E., & Christensen, E.E. 1990. *Christensen's physics of diagnostic radiology*. Lippincott Williams & Wilkins.

- [Perl, 2007] Perl, J. 2007. North American Medical Physics Applications of the Geant4 Simulation Toolkit. *10th ICATPP Conference on Astroparticle, Particle, Space Physics, Detectors and Medical Physics Applications*.
- [R.D. Deslattes & R.A. Dragoset, 2009] R.D. Deslattes, E.G. Kessler Jr., P. Indelicato L. de Billy E. Lindroth J. Anton J.S. Coursey D.J. Schwab C. Chang R. Sukumar K. Olsen, & R.A. Dragoset. 2009. X-ray Transition Energies (version 1.2). *National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD*.
- [S. Agostinelli, 2003] S. Agostinelli, et al. 2003. Geant4 — a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, **A**(506), 250–303.
- [Sprawls, 1987] Sprawls, P. 1987. *Physical principles of medical imaging*. Lippincott Williams and Wilkins.
- [Vidal & Gabriela, 2008] Vidal, F.P., & Gabriela, H. 2008. Geant4 validation on mammography applications. *Pages 3497–3498 of: IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record, 2008. NSS'08*.

A Anexos

A.1 Instalação do Geant4 v9.2 no *Ubuntu Linux 9.04*

Antes de partir para a compilação do código-fonte do Geant4, é preciso verificar no sistema a existência de alguns programas necessários para a tarefa e instalá-los caso não estejam em seu sistema. São eles:

- Compilador *C++* (Prefira o GCC com as bibliotecas do *g++*)

Biblioteca *CLHEP* (*a Class Library with High Energy Physics*). Para a versão 9.2 do Geant4, deverá ser utilizada a versão *CLHEP 2.0.4.0* ou superior, sob o risco de obter valores incorretos em simulações.

- *GNU Make*;

- Código-fonte do Geant4 versão 9.2 ou mais recentes;

- Pacote *G4EMLOW*, para processos eletromagnéticos de baixa energia;

- Pacote *OpenGL* se quiser usá-lo (Ex: *FreeMesa3-dev*)

- Pacote *libXmu-dev*, pelo comando `apt-get install libXmu-dev`

Após obter todos os pacotes necessários, é hora de descompactá-los. Como padrão utilizamos o diretório “/home/usuario”. Assim, o *CLHEP* foi descompactado em “/home/usuario/CLHEP”. Posteriormente o Código-fonte do Geant4.9.2 em um diretório de “/home/usuario/geant4/geant4.9.2” e o pacote *G4EMLOW*, deve ser obrigatoriamente descompactado em uma nova pasta denominada “data”, dentro do diretório onde o geant4 foi descompactado, no caso “/home/usuario/geant4/geant4.9.2/data”, então existirá uma pasta “*G4EMLOW*” dentro do diretório data.

O próximo passo é a instalação do *CLHEP*. O processo é bastante simples, necessitando apenas um pouco de atenção nos diretórios. Primeiramente deve-se acessar o diretório “.././CLHEP/2.0.4.0/CLHEP” e digitar o comando:

```
./configure --prefix .././CLHEP
```

Prestando atenção que o diretório indicado neste comando é o principal do *CLHEP*, como /home/usuario/CLHEP, e não “/home/usuario/CLHEP/2.0.4.0/CLHEP”. Caso tenha feito corretamente a configuração se iniciará.

Após a configuração pode-se iniciar a compilação com o comando “make” e após esta tarefa, com “**make install**” para finalizar a instalação. Os arquivos de saída com todas as mensagens de instalação e configuração podem ser encontrados no diretório de instalação do *CLHEP*.

Agora estamos em um ponto crítico. Descompactamos o Geant4, o pacote *G4EMLOW* no diretório data e instalamos o *CLHEP*. É preciso muita atenção a partir de agora, pois erros podem, eventualmente, acarretar um longo tempo perdido para concertá-los.

Primeiramente certifique-se de que não há nenhuma variável do Geant4 pré-existente em seu sistema. Claro que se esta for sua primeira instalação em sua máquina, não teremos esse problema, mas por segurança pode-se digitar o comando “*printenv | grep G4*” e se alguma variável for encontrada, remova-as (provavelmente dos arquivos de “*login*” ou “*shrc*”). Finalmente, a partir do seu Terminal escolhido, adentre o diretório do Geant4 e digite, lembrando-se que o *Linux* distingue minúsculas e maiúsculas, o comando:

./Configure -build

Seguirão séries de perguntas as quais você precisa ler com atenção mas pode deixar a maioria no padrão dado pelo programa. Algumas são interessantes mudar:

- “*Do you want to copy all Geant4 headers in one directory?*” Responda “y”;
- Quando pedir o diretório do *CLHEP* identifique-o corretamente (ele irá pedir novamente se você errar o local);
- “*Do you want to build shared libraries?*” Responda “y”;
- “*G4VIS_BUILD_OPENGLX_DRIVER*” e “*G4VIS_USE_OPENGLX*”, Responda “y” se quiser usar (na resposta posterior, do *OPENGLXM*, mantenha a resposta padrão “n”);
- “*G4VIS_BUILD_ZLIB*”, sugiro “y”, mas não é obrigatório (serve para utilizar o *HepRepFile*);
- “*ANALYSIS_USE*”, responda “y” se for usar o *AIDA*.

Respondidas todas as perguntas chegaremos ao início da compilação, que dura em média uma hora. Terminado o processo de compilação, se não houver erros, digite:

./Configure

ele criará os arquivos de “*environments*”. Você deve copiá-los para uma pasta nova chamada “geant4” em “/home/usuario/”. Para iniciar o Geant4, entre via terminal nessa pasta e digite “. ./env.sh” (para bash) ou “. ./env.csh” (para csh e tcsh).

Compile algum exemplo como o N02 na pasta “geant4.9.2/Examples/novice”, copiando toda a pasta “N02” para o seu diretório “geant4” criado acima e rode o comando “make” dentro da pasta do exemplo “geant4/N02”. Se tudo ocorrer bem com a compilação, o executável será criado em “geant4/bin/Linux-g++”. Caso a pasta “bin” não seja criada, digite “*export G4WORKDIR=/home/usuario/geant4*” e compile novamente. se não houver erros na execução do exemplo, o Geant4 estará corretamente instalado.

A.2 Geometrias no *DetectorConstruction*

Abaixo as descrições de partes dos nossos códigos para simulação do espectro de raios-X:

Geometria do Alvo:

```
G4Box* sTarget = new G4Box("Target",TargetSizeX, TargetSizeYZ, TargetSizeYZ);
G4LogicalVolume*
  lTarget = new G4LogicalVolume(sTarget, Mo, "World");
  G4RotationMatrix* Trot = new G4RotationMatrix(); //Matriz de Rotação
  Trot->rotateZ(-17.*deg);
  pTarget = new G4PVPlacement(Trot, G4ThreeVector(),
    lTarget, "Target", lWorld, 0, false, 0);
```

Geometria dos Filtros (Ex. Berílio):

```
G4Box* sFilter1 = new G4Box("Filter1", FilterSizeXZ, Filter1SizeY, FilterSizeXZ);
G4LogicalVolume*
  lFilter1 = new G4LogicalVolume(sFilter1, Be, "World");
  pFilter1 = new G4PVPlacement (0, G4ThreeVector(0.*cm, -20.*mm, 0.*cm),
    lFilter1, "Filter1", lWorld, 0, false, 0);
```

A.3 Obtendo a energia cinética pela função *ProcessHits*

```
G4bool RxDetectorSD::ProcessHits(G4Step* aStep, G4TouchableHistory*)
{
  if(particle->GetParticleName() == "gamma") {
    energia = theTrack->GetKineticEnergy();
    DetCon->incrementaHistograma(energia/keV); }
}
```