



Universidade Federal de Uberlândia  
Faculdade de Engenharia Elétrica  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Biomédica

**Isabella Pereira Tobias**

**Uberlândia**

**2024**

Isabella Pereira Tobias

**Avaliação de dose absorvida em procedimentos de radiologia intervencionista usando simulação de Monte Carlo para construção de modelos de aprendizado de máquina**

**Tese** de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Biomédica da Faculdade de Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Tecnologias em Radiações, Imagens Médicas e Biológicas

Faculdade de Engenharia Elétrica - FEELT

Orientador: Prof. Dr. Lucio Pereira Neves

Uberlândia

2024

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU  
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

|              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| T629<br>2024 | <p>Tobias, Isabella Pereira, 1997-<br/>Avaliação de dose absorvida em procedimentos de radiologia intervencionista usando simulação de Monte Carlo para construção de modelos de aprendizado de máquina [recurso eletrônico] / Isabella Pereira Tobias.<br/>- 2024.</p> <p>Orientador: Lucio Pereira Neves.<br/>Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia,<br/>Doutorado em Engenharia Biomédica.<br/>Modo de acesso: Internet.<br/>Disponível em: <a href="http://doi.org/10.14393/ufu.te.2024.797">http://doi.org/10.14393/ufu.te.2024.797</a><br/>Inclui bibliografia.<br/>Inclui ilustrações.</p> <p>1. Engenharia biomédica. I. Neves, Lucio Pereira, 1982-<br/>, (Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia.<br/>Doutorado em Engenharia Biomédica. III. Título.</p> <p>CDU: 62:61</p> |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091  
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**  
Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Biomédica

Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 3N, Sala 115 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG,  
CEP 38400-902

Telefone: (34) 3239-4761 - www.ppgeb.feelt.ufu.br - ppegb@feelt.ufu.br



**ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO**

|                                    |                                                                                                                                                               |                 |          |                       |           |
|------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|----------|-----------------------|-----------|
| Programa de Pós-Graduação em:      | Engenharia Biomédica                                                                                                                                          |                 |          |                       |           |
| Defesa de:                         | Tese, 007, PPGEB                                                                                                                                              |                 |          |                       |           |
| Data:                              | dezessete de dezembro de dois mil e vinte e quatro                                                                                                            | Hora de início: | 09 horas | Hora de encerramento: | 11h:50min |
| Matrícula do Discente:             | 12123EBI004                                                                                                                                                   |                 |          |                       |           |
| Nome do Discente:                  | Isabella Pereira Tobias                                                                                                                                       |                 |          |                       |           |
| Título do Trabalho:                | Avaliação de dose absorvida em procedimentos de radiologia intervencionista usando simulação Monte Carlo para construção de modelos de aprendizado de máquina |                 |          |                       |           |
| Área de concentração:              | Engenharia Biomédica                                                                                                                                          |                 |          |                       |           |
| Linha de pesquisa:                 | Tecnologias em Radiações, Imagens Médicas e Biológicas                                                                                                        |                 |          |                       |           |
| Projeto de Pesquisa de vinculação: | Dosimetria numérica em procedimentos de radioembolização hepática                                                                                             |                 |          |                       |           |

Reuniu-se via Plataforma Google Meet, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Biomédica, assim composta: Professores Doutores: Divanizia do Nascimento Souza - UFS; William de Souza Santos - UFS; João Vinícius Batista Valença - UFCSPA; Teógenes Augusto da Silva - CDTN/CNEN/MG; Lucio Pereira Neves - PPGEB/UFU orientador da candidata.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. Lucio Pereira Neves, apresentou a Comissão Examinadora e a candidata, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos examinadores, que passaram a arguir a candidata. Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando a candidata

Aprovada.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.



Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Lucio Pereira Neves, Professor(a) do Magistério Superior**, em 17/12/2024, às 11:56, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **William de Souza Santos, Usuário Externo**, em 17/12/2024, às 11:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Divanizia do Nascimento Souza, Usuário Externo**, em 17/12/2024, às 11:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Vinícius Batista Valença, Usuário Externo**, em 17/12/2024, às 11:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Teogenes Augusto da Silva, Usuário Externo**, em 17/12/2024, às 12:01, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://www.sei.ufu.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **5971416** e o código CRC **F1619EC2**.

*Ao Dr. Luiz Eduardo Mesquita pelo apoio à minha formação*

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus.

Agradeço à minha mãe, Maiza Silva, pelo apoio emocional e financeiro.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Lucio Neves pelas aulas, pelo convite para fazer parte da família LInDa, por todos os conselhos, pela paciência e ajuda nesses dois últimos anos me guiando nos primeiros passos da pós-graduação. Agradeço também à Prof<sup>a</sup>. Dra. Ana Paula Perini, um exemplo de mulher e pesquisadora, obrigada por todas as contribuições com o trabalho e pela valiosa amizade.

À Bruna pelas conversas envolvendo comunicação não-violenta, boa vontade, companheirismo e incentivo durante o processo de desenvolvimento e escrita.

Aos meus amigos, pelos incentivos durante minha trajetória neste curso. À Ana Paula sempre tão dedicada em tudo que fez, fico muito feliz por ter a sua amizade para além da área acadêmica. À Monique pelas palavras de conforto, ligações e ajudas que fizeram esse estudo possível. Ao Gabriel pelo apoio, chás de sábado e reuniões mesmo durante a pandemia. À Andressa pela longa amizade e histórias contadas. Ao Rafael, obrigada pelos peixes.

Aos professores, que me guiaram até aqui.

Ao laboratório LInDa, pelo acolhimento, oportunidade para desenvolver este trabalho. Ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Biomédica pela infraestrutura oferecida e pela oportunidade de desenvolver este trabalho.

Ao CNPq pelo apoio financeiro mediante o projeto "Dosimetria em tempo real de procedimentos de Radiologia Intervencionista empregando os Métodos de Monte Carlo e Machine Learning"(No. 314520/2020-1).

À Universidade Federal de Uberlândia e ao CNPq, pelo apoio financeiro para realização deste trabalho de pesquisa. Ao apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior Brasil (CAPES) processo nº 88887.509814/2020-00.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais, e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelos projetos que contribuíram para o desenvolvimento do trabalho: FAPEMIG - APQ-02934-15, FAPEMIG - APQ03049-15, CNPq - 421603/2016-0, CNPq - 420699/2016-3, CNPq - 14520/2020-1, CNPq - 312124/2021-0 e CNPq - 312160/2023-2. Este trabalho faz parte do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia – Instrumentação Nuclear e Aplicações na Indústria e Saúde (INCT.INAIS), projeto CNPq 406303/2022-3.

*“Einstein, pare de dizer a Deus o que ele deve fazer”*  
*(Niels Bohr)*

# Resumo

As equipes médicas passam longos períodos de tempo expostas à radiação ionizante decorrente de feixes de raios-X que são utilizados durante os procedimentos de radiologia intervencionista (RI). A longa exposição durante a jornada de trabalho pode levar a problemas de saúde, sobretudo se os equipamentos individuais de proteção recomendados não estiverem sendo usados da maneira correta ou em condições adequadas. No Brasil, o número de procedimentos de RI tem crescido e é possível observar um uso maior de radiações ionizantes para tratamento médico. Desta forma, há a necessidade do desenvolvimento de procedimentos que auxiliem e aumentem a proteção da equipe médica que trabalha diretamente nessas intervenções. Este trabalho investiga a aplicação de modelos de aprendizado de máquina na previsão de doses de radiação absorvidas utilizando simulações Monte Carlo baseadas em salas de hemodinâmica através o código MCNP6.2, refletindo condições reais de operação. O objetivo geral deste estudo é o desenvolvimento de um método de aplicação dos modelos de aprendizado de máquina para estimar os valores de dose absorvida nos órgãos da equipe médica durante procedimentos de RI. Os resultados mostraram que os modelos analisados apresentaram desempenhos variados. As métricas de desempenho, como Erro Quadrático Médio (MSE), Erro Absoluto Médio (MAE), indicaram que modelos baseados em árvore de decisão foram os mais precisos entre os modelos testados. A validação das previsões dos modelos em relação aos dados simulados do MCNP sugere que as ferramentas de aprendizado de máquina são eficazes na análise e previsão de doses. Este estudo não apenas contribui para a compreensão do uso de modelos preditivos na radiologia, mas também destaca a relevância clínica das simulações em ambientes de hemodinâmica, visando aumentar a segurança de pacientes e profissionais de saúde. Futuros trabalhos poderão expandir essa pesquisa, integrando dados adicionais e explorando técnicas práticas para aprimorar ainda mais a precisão das previsões.

**Palavras-chaves:** Radiologia Intervencionista. Simulação Monte Carlo. Aprendizado de Máquina.

# Abstract

Medical teams spend long periods of time exposed to ionizing radiation arising from x-ray beams used during interventional radiology (IR) procedures. Long exposure during the workday can lead to health problems, especially if the recommended personal protective equipment is not being used correctly or under adequate conditions. In Brazil, the number of IR procedures has grown and it is possible to observe a greater use of ionizing radiation for medical treatment. Thus, there is a need to develop procedures that assist and increase the protection of the medical team that works directly in these interventions. This work investigates the application of machine learning models in the prediction of absorbed radiation doses using Monte Carlo simulations based on hemodynamic rooms through the MCNP6.2 code, reflecting real operating conditions. The general objective of this study is to develop a method for applying machine learning models to estimate the absorbed dose values in the organs of the medical team during IR procedures. The results showed that the analyzed models presented varied performances. Performance metrics, such as Mean Squared Error (MSE) and Mean Absolute Error (MAE), indicated that decision tree-based models were the most accurate among the tested models. Validation of model predictions against simulated MCNP data suggests that machine learning tools are effective in analyzing and predicting doses. This study not only contributes to the understanding of the use of predictive models in radiology, but also highlights the clinical relevance of simulations in hemodynamic settings, aiming to increase the safety of patients and healthcare professionals. Future work could expand this research by integrating additional data and exploring practical techniques to further improve prediction accuracy.

**Keywords:** Interventional Radiology. Monte Carlo simulation. Machine Learning.

# Lista de ilustrações

|           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |    |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1  | – Exemplos de equipamentos de proteção radiológica. Imagem retirada de <a href="https://proteg.net.br/epi-radiologia-conheca-os-principais-equipamentos-de-protecao-radiologica/">https://proteg.net.br/epi-radiologia-conheca-os-principais-equipamentos-de-protecao-radiologica/</a> . Visto em 29/09/2022.                                                                                                          | 36 |
| Figura 2  | – Configuração de divisão dos dados treino/teste. Disponível em <a href="https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2">https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2</a> . Visto em 24/10/2024.                                                                                                                                                                                     | 44 |
| Figura 3  | – Configuração de validação cruzada no método <i>K-fold</i> . Disponível em <a href="https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2">https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2</a> . Acessado em 24/10/2024.                                                                                                                                                                      | 44 |
| Figura 4  | – Ilustração de terminologias relacionadas à árvore de decisão. Disponível em <a href="https://www.vooo.pro/insights/um-tutorial-completo-sobre-a-modelagem-baseada-em-tree-arvore-do-zero-em-r-python/">https://www.vooo.pro/insights/um-tutorial-completo-sobre-a-modelagem-baseada-em-tree-arvore-do-zero-em-r-python/</a> . Acessado em 25/10/2024.                                                                | 48 |
| Figura 5  | – Ilustração da estrutura do modelo de floresta aleatória. Disponível em <a href="https://pt.linkedin.com/pulse/entendendo-o-algoritmo-random-forest-e-suas-aplica%C3%A7%C3%B5es-julio-rena-aa1yc">https://pt.linkedin.com/pulse/entendendo-o-algoritmo-random-forest-e-suas-aplica%C3%A7%C3%B5es-julio-rena-aa1yc</a> . Acessado em 25/10/2024.                                                                       | 49 |
| Figura 6  | – Ilustração da estrutura geral do algoritmo de <i>Gradient Boosting</i> . Disponível em <a href="https://www.researchgate.net/figure/The-general-structure-of-the-gradient-boosting-algorithm-which-is-based-on-boosting-the_fig2_368703957">https://www.researchgate.net/figure/The-general-structure-of-the-gradient-boosting-algorithm-which-is-based-on-boosting-the_fig2_368703957</a> . Acessado em 25/10/2024. | 50 |
| Figura 7  | – Ilustração da estrutura de redes neurais. Disponível em <a href="https://www.open-cadd.com.br/blog/o-que-sao-redes-neurais">https://www.open-cadd.com.br/blog/o-que-sao-redes-neurais</a> . Acessado em 25/10/2024.                                                                                                                                                                                                  | 52 |
| Figura 8  | – Visão geral do equipamento de proteção radiológica. (A) Equipamento do médico e equipe médica: 1. Protetor ocular; 2. Protetor da tireoide; 3. Avental de chumbo. (B) Componentes adicionais: 4. Phantom do cardiologista; 5. Phantom da equipe médica; P. Phantom do paciente. (C) Posições da equipe médica (1 a 26).                                                                                              | 69 |
| Figura 9  | – Gráfico de dispersão para o modelo de Regressão Linear simples entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.                                                                                                                                                                                                                                                                   | 72 |
| Figura 10 | – Gráfico de dispersão para o modelo de Regressão Linear simples entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.                                                                                                                                                                                                                                                                     | 72 |
| Figura 11 | – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo Regressão Linear simples.                                                                                                                                                                                                                                                                  | 73 |

|                                                                                                                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 12 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de Regressão Linear simples . . . . .                  | 73 |
| Figura 13 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Lasso entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .     | 74 |
| Figura 14 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Lasso entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .       | 75 |
| Figura 15 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de regressão linear com regularização Lasso. . . . . | 75 |
| Figura 16 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de regressão linear com regularização Lasso. . . . .   | 76 |
| Figura 17 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Ridge entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .     | 77 |
| Figura 18 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Ridge entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .       | 77 |
| Figura 19 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de regressão linear com regularização Ridge. . . . . | 78 |
| Figura 20 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de regressão linear com regularização Ridge. . . . .   | 78 |
| Figura 21 – Gráfico de dispersão para o modelo de Elastic Net entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .                                  | 80 |
| Figura 22 – Gráfico de dispersão para o modelo Elastic Net entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .                                       | 80 |
| Figura 23 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de Elastic Net. . . . .                              | 81 |
| Figura 24 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de Elastic Net. . . . .                                | 81 |
| Figura 25 – Gráfico de dispersão para o modelo de Decision Tree entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .                                | 82 |
| Figura 26 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>Decision Tree</i> entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .                           | 83 |



|                                                                                                                                                                             |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 27 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de <i>Decision Tree</i> . . . . .     | 83 |
| Figura 28 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de <i>Decision Tree</i> . . . . .       | 84 |
| Figura 29 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>Random Forest</i> entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .          | 85 |
| Figura 30 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>Random Forest</i> entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .            | 85 |
| Figura 31 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de <i>Random Forest</i> . . . . .     | 86 |
| Figura 32 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de <i>Random Forest</i> . . . . .       | 86 |
| Figura 33 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>Gradient Boosting</i> entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .      | 88 |
| Figura 34 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>Gradient Boosting</i> entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .        | 88 |
| Figura 35 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de <i>Gradient Boosting</i> . . . . . | 89 |
| Figura 36 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de <i>Gradient Boosting</i> . . . . .   | 89 |
| Figura 37 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>XGBoost</i> entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .                | 90 |
| Figura 38 – Gráfico de dispersão para o modelo de <i>XGBoost</i> entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .                  | 91 |
| Figura 39 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de <i>XGBoost</i> . . . . .           | 91 |
| Figura 40 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de <i>XGBoost</i> . . . . .             | 92 |
| Figura 41 – Gráfico de dispersão para o modelo de SVR entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .                           | 93 |
| Figura 42 – Gráfico de dispersão para o modelo de SVR entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .                             | 93 |
| Figura 43 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de SVR. . . . .                       | 94 |

|                                                                                                                                                       |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 44 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de SVR. . . . .   | 94 |
| Figura 45 – Gráfico de dispersão para o modelo de MLP entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência. . . . .     | 96 |
| Figura 46 – Gráfico de dispersão para o modelo de MLP entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência. . . . .       | 96 |
| Figura 47 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de MLP. . . . . | 97 |
| Figura 48 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de MLP. . . . .   | 97 |
| Figura 49 – Gráfico de comparação de métricas MAE, MSE e MRE por modelo. . . . .                                                                      | 98 |
| Figura 50 – Gráfico de comparação de métrica $R^2$ por modelo. . . . .                                                                                | 99 |
| Figura 51 – Gráfico de comparação de métrica MRE por modelo. . . . .                                                                                  | 99 |

# Lista de abreviaturas e siglas

|       |                                                                                                                                 |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ALARA | <i>As Low As Reasonably Achievable</i> - Tão baixo quanto razoavelmente exequível                                               |
| AP    | Anteroposterior                                                                                                                 |
| D     | Dose absorvida                                                                                                                  |
| DCC   | <i>Dose Conversion Coefficient</i> - Coeficiente de Conversão de Dose                                                           |
| DNA   | <i>Deoxyribonucleic acid</i>                                                                                                    |
| DNN   | <i>Deep Neural Network</i>                                                                                                      |
| E     | Dose efetiva                                                                                                                    |
| EPI   | Equipamento de proteção individual                                                                                              |
| EXTR  | <i>Extra Trees Regressor</i>                                                                                                    |
| FASH  | Malha adulta feminina                                                                                                           |
| GB    | <i>Gradient Boosting</i>                                                                                                        |
| Gy    | Gray                                                                                                                            |
| IA    | Inteligência artificial                                                                                                         |
| ICRP  | <i>International Commission on Radiological Protection</i> - Comissão Internacional de Proteção Radiológica                     |
| ICRU  | <i>International Commission on Radiation Units and Measurements</i> - Comissão Internacional de Unidades e Medições de Radiação |
| IOE   | Indivíduo ocupacionalmente exposto                                                                                              |
| IR    | <i>Interventional radiology</i>                                                                                                 |
| LAT   | Lateral                                                                                                                         |
| m     | massa                                                                                                                           |
| MAE   | <i>Mean Absolute Error</i> - Erro Absoluto Médio                                                                                |
| MASH  | Malha adulta masculina                                                                                                          |
| MCNP  | <i>Monte Carlo N-Particle Transport Code</i>                                                                                    |

|       |                                                                                 |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------|
| ML    | <i>Machine Learning</i> - Aprendizado de Máquina                                |
| MLP   | <i>Multilayer Perceptron</i>                                                    |
| MRE   | <i>Mean Relative Error</i> - Erro Relativo Médio                                |
| MSE   | <i>Mean Squared Error</i> - Erro Quadrático Médio                               |
| OSL   | <i>Optically Stimulated Luminescence</i> - Luminescência Estimulada Opticamente |
| PA    | Posteroanterior                                                                 |
| ReLU  | <i>Rectified Linear Unit</i>                                                    |
| RI    | Radiologia intervencionista                                                     |
| RM    | Ressonância magnética                                                           |
| RMSE  | <i>Root Mean Square Deviation</i> - Erro Quadrático Médio da Raiz               |
| $R^2$ | <i>Coefficient of Determination</i> - Coeficiente de Determinação               |
| SI    | Sistema Internacional de Unidades                                               |
| Sv    | Sievert                                                                         |
| SVR   | <i>Support Vector Regression</i> - Suporte Vetorial de Regressão                |
| TC    | Tomografia computadorizada                                                      |
| TLD   | Termoluminescência dosimétrica                                                  |
| XGB   | <i>Extreme Gradient Boosting</i>                                                |



# Sumário

|            |                                                               |           |
|------------|---------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b>   | <b>INTRODUÇÃO</b>                                             | <b>18</b> |
| <b>2</b>   | <b>REVISÃO DA LITERATURA</b>                                  | <b>21</b> |
| 2.1        | Fundamentos de Radiação Ionizante e Dose Absorvida            | 21        |
| 2.2        | Métodos de Cálculo de Dose                                    | 21        |
| 2.3        | Aprendizado de Máquina na Física Médica                       | 22        |
| 2.4        | Abordagens Tradicionais vs Modelos de Aprendizado de Máquina  | 22        |
| 2.5        | Validação de Modelos de Aprendizado de Máquina                | 23        |
| 2.6        | Estudos de Caso                                               | 24        |
| 2.6.1      | Aprendizado de máquina para prever a dose efetiva de nêutrons | 24        |
| 2.6.2      | Previsão de viés do MCNP usando aprendizado de máquina        | 26        |
| 2.7        | Desafios e Limitações                                         | 27        |
| 2.8        | Tendências Futuras                                            | 28        |
| 2.9        | Integração de Dados em Pesquisa                               | 28        |
| <b>3</b>   | <b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>                                  | <b>30</b> |
| <b>3.1</b> | <b>Radiação</b>                                               | <b>30</b> |
| 3.1.1      | Radiação Ionizante                                            | 31        |
| <b>3.2</b> | <b>Radiação Ionizante na Medicina</b>                         | <b>32</b> |
| 3.2.1      | Radiologia Intervencionista                                   | 33        |
| 3.2.2      | Proteção Radiológica                                          | 34        |
| 3.2.2.1    | Equipamentos de Proteção Individual                           | 35        |
| <b>3.3</b> | <b>Dosimetria das Radiações Ionizantes</b>                    | <b>36</b> |
| 3.3.1      | Dosimetria Interna                                            | 37        |
| 3.3.2      | Dosimetria Externa                                            | 37        |
| 3.3.3      | Grandezas Dosimétricas                                        | 37        |
| 3.3.3.1    | Dose Absorvida                                                | 38        |
| 3.3.3.2    | Dose Equivalente                                              | 38        |
| 3.3.3.3    | Dose Efetiva                                                  | 39        |
| <b>3.4</b> | <b>Simulação Monte Carlo</b>                                  | <b>39</b> |
| 3.4.1      | Na Física Médica                                              | 40        |
| 3.4.2      | Método Monte Carlo na dosimetria individual                   | 41        |
| 3.4.2.1    | Na Radiologia Intervencionista                                | 42        |
| <b>3.5</b> | <b>Modelos de Aprendizado de Máquina</b>                      | <b>42</b> |
| 3.5.1      | Divisão dos Dados                                             | 43        |
| 3.5.1.1    | Divisão Treino/Teste                                          | 43        |

|            |                                                     |           |
|------------|-----------------------------------------------------|-----------|
| 3.5.1.2    | Validação Cruzada . . . . .                         | 44        |
| 3.5.2      | Modelos Lineares . . . . .                          | 45        |
| 3.5.2.1    | Regressão Linear . . . . .                          | 45        |
| 3.5.2.2    | Regressão Linear com Regularização . . . . .        | 45        |
| 3.5.2.2.1  | Regularização Lasso . . . . .                       | 46        |
| 3.5.2.2.2  | Regularização Ridge . . . . .                       | 46        |
| 3.5.2.3    | Elastic Net . . . . .                               | 47        |
| 3.5.3      | Modelos de Árvore de Decisão . . . . .              | 47        |
| 3.5.3.1    | Árvore de Decisão - <i>Decision Tree</i> . . . . .  | 47        |
| 3.5.3.2    | Floresta Aleatória - <i>Random Forest</i> . . . . . | 48        |
| 3.5.3.3    | <i>Gradient Boosting</i> . . . . .                  | 49        |
| 3.5.3.3.1  | <i>XGBoost</i> . . . . .                            | 50        |
| 3.5.4      | <i>Support Vector Regression</i> - SVR . . . . .    | 51        |
| 3.5.5      | Redes Neurais . . . . .                             | 52        |
| 3.5.5.1    | <i>Multilayer Perceptron</i> - MLP . . . . .        | 53        |
| 3.5.5.1.1  | Função de Ativação ReLU . . . . .                   | 53        |
| 3.5.6      | AutoML . . . . .                                    | 54        |
| <b>3.6</b> | <b>Métricas para Análise dos Modelos . . . . .</b>  | <b>54</b> |
| 3.6.1      | Erro Médio Absoluto - MAE . . . . .                 | 55        |
| 3.6.2      | Erro Quadrático Médio - MSE . . . . .               | 55        |
| 3.6.3      | Erro Relativo Médio - MRE . . . . .                 | 56        |
| 3.6.4      | Raiz do Erro Quadrático Médio - RMSE . . . . .      | 56        |
| 3.6.5      | Coeficiente de Determinação - $R^2$ . . . . .       | 56        |
| <b>4</b>   | <b>MATERIAIS E MÉTODOS . . . . .</b>                | <b>58</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Materiais . . . . .</b>                          | <b>58</b> |
| 4.1.1      | Software Monte Carlo N-Particle (MCNP) . . . . .    | 58        |
| 4.1.1.1    | Objeto Simulador Antropomórfico Virtual . . . . .   | 59        |
| 4.1.1.2    | Python . . . . .                                    | 59        |
| <b>4.2</b> | <b>Métodos . . . . .</b>                            | <b>59</b> |
| 4.2.1      | Método de Monte Carlo . . . . .                     | 59        |
| 4.2.2      | Pré-processamento dos Dados . . . . .               | 60        |
| 4.2.3      | Divisão dos Dados . . . . .                         | 61        |
| 4.2.3.1    | Divisão Treino/Teste . . . . .                      | 61        |
| 4.2.3.2    | Validação Cruzada . . . . .                         | 62        |
| 4.2.4      | Modelos de Aprendizado de Máquina . . . . .         | 62        |
| 4.2.4.1    | Modelos Lineares . . . . .                          | 62        |
| 4.2.4.1.1  | Regressão Linear . . . . .                          | 62        |
| 4.2.4.1.2  | Regressão de Lasso . . . . .                        | 63        |
| 4.2.4.1.3  | Regressão de Ridge . . . . .                        | 63        |

|            |                                                     |            |
|------------|-----------------------------------------------------|------------|
| 4.2.4.1.4  | Elastic Net . . . . .                               | 63         |
| 4.2.4.2    | Modelos de Árvore de Decisão . . . . .              | 64         |
| 4.2.4.2.1  | Árvore de Decisão - <i>Decision Tree</i> . . . . .  | 64         |
| 4.2.4.2.2  | Floresta Aleatória - <i>Random Forest</i> . . . . . | 64         |
| 4.2.4.2.3  | <i>Gradient Boosting</i> . . . . .                  | 64         |
| 4.2.4.2.4  | <i>XGBoost</i> . . . . .                            | 65         |
| 4.2.4.3    | <i>Support Vector Regression - SVR</i> . . . . .    | 65         |
| 4.2.4.4    | <i>Multilayer Perceptron</i> . . . . .              | 65         |
| 4.2.4.5    | AutoML . . . . .                                    | 66         |
| 4.2.5      | Métricas para Análise dos Modelos . . . . .         | 66         |
| <b>5</b>   | <b>RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .</b>            | <b>68</b>  |
| <b>5.1</b> | <b>Cenários Simulados . . . . .</b>                 | <b>68</b>  |
| <b>5.2</b> | <b>Modelos de Aprendizado de Máquina . . . . .</b>  | <b>70</b>  |
| 5.2.1      | Regressão Linear . . . . .                          | 70         |
| 5.2.2      | Regressão de Lasso . . . . .                        | 72         |
| 5.2.3      | Regressão de Ridge . . . . .                        | 75         |
| 5.2.4      | Elastic Net . . . . .                               | 78         |
| 5.2.5      | Árvore de Decisão - <i>Decision Tree</i> . . . . .  | 81         |
| 5.2.6      | Floresta Aleatória - <i>Random Forest</i> . . . . . | 84         |
| 5.2.7      | <i>Gradient Boosting</i> . . . . .                  | 86         |
| 5.2.7.1    | <i>XGBoost</i> . . . . .                            | 88         |
| 5.2.8      | <i>Support Vector Regression - SVR</i> . . . . .    | 92         |
| 5.2.9      | <i>Multilayer Perceptron - MLP</i> . . . . .        | 95         |
| 5.2.10     | AutoML . . . . .                                    | 96         |
| <b>6</b>   | <b>CONCLUSÕES . . . . .</b>                         | <b>101</b> |
|            | <b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>                        | <b>103</b> |



# 1 Introdução

Na radiologia intervencionista (RI), a equipe médica passa longos períodos de tempo exposta à radiação ionizante por meio dos raios-x que são utilizados durante os procedimentos. A exposição ao longo da jornada de trabalho pode levar a problemas de saúde, sobretudo se os equipamentos de proteção individual (EPI) recomendados não estiverem sendo usados da maneira correta ou em condições adequadas (1, 2).

Estudos têm mostrado que a exposição prolongada à radiação ionizante pode levar ao desenvolvimento de cataratas, cânceres, e outras condições de saúde graves em trabalhadores ocupacionalmente expostos (IOE). Apesar das medidas de proteção, o risco persiste, principalmente em ambientes de RI, onde a exposição é contínua e cumulativa ao longo da carreira profissional (3).

Para obter estimativas mais precisas na análise dosimétrica, a simulação Monte Carlo é empregada. Essa técnica permite calcular a energia depositada em órgãos e tecidos, principalmente por meio do uso de objetos simuladores.(4, 5).

O uso dos objetos simuladores computacionais humanos usados nas simulações é de extrema importância para dosimetria numérica de radiações ionizantes. Estes objetos simuladores são semelhantes ao corpo humano no sentido de massa, densidade e tamanho dos órgãos e tecidos internos, e são utilizados para avaliar as doses absorvidas ou equivalentes nos órgãos e tecidos (5).

O Método Monte Carlo é altamente preciso, porém exige grande poder computacional e tempo de processamento, por isso ele raramente é usado na rotina clínica. Desta forma, se faz necessário desenvolver procedimentos de dosimetria rápida baseada em técnicas que levam em conta a necessidade de um processo mais dinâmico (6).

Um desses métodos é o aprendizado de máquina (AM) que permite que padrões complexos sejam aprendidos a partir de grandes conjuntos de dados, oferecendo uma forma de acelerar o cálculo de doses absorvidas sem sacrificar a precisão (7, 8).

Avanços recentes no uso de AM em áreas médicas têm demonstrado o potencial dessas tecnologias para resolver problemas complexos. A capacidade destes modelos em reconhecer padrões nos valores e prever resultados com alta precisão oferece um novo horizonte para a otimização dos processos de dosimetria, tornando-os mais acessíveis e dinâmicos em ambientes clínicos (9).

Uma forma não invasiva de calcular a dose sobre os órgãos e tecidos é de forma computacional, e quando utilizado o Método Monte Carlo fica-se limitado a projeções estáticas e de lento processamento (10). Portanto, a junção entre o Método Monte Carlo e

o AM pode trazer valores de dose de modo dinâmico durante procedimentos de RI.

Tendo como referência os valores de dose baseado nas simulações, os modelos de AM podem ser então treinados para gerar valores de dose como saída. Desta forma, é possível identificar as variáveis reais e buscar os respectivos valores de dose, evitando armazenamento caro e processamento dos dados brutos que requerem muito tempo e recursos computacionais.

Ao se construir um banco de dados com as simulações Monte Carlo com as posições mais prováveis e comuns durante procedimentos, esses dados podem ser usados como treinamento e validação para os algoritmos a fim de obter dosimetria em tempo real e de prever os valores de dose outras posições na sala.

Embora existam trabalhos que utilizaram AM para estimativa de doses de radiação, este estudo se diferencia ao integrar simulações do Método Monte Carlo com modelos de AM focando em procedimentos de RI, criando uma abordagem híbrida capaz de oferecer resultados em tempo real durante procedimentos de RI. Essa metodologia, ao utilizar um banco de dados customizado, otimiza tanto o tempo quanto a precisão dos cálculos de dose, contribuindo diretamente para a segurança dos trabalhadores expostos.

O objetivo geral deste estudo foi a construção de um método de cálculo de dose de radiação interna, através da avaliação de modelos de AM para estimar os valores de dose absorvida nos órgãos dos IOE durante procedimentos de RI. O código Monte Carlo foi utilizado para recriar o cenário computacionalmente de uma sala de hemodinâmica com o intuito de obter um banco de dados com as doses nos órgãos e tecidos de cada indivíduo da equipe médica.

Os diferentes modelos de AM foram treinados com este banco de dados visando prever com precisão as doses absorvidas e comparar seus desempenhos. Para avaliar o desempenho dos modelos, foram utilizadas métricas incluindo Erro Quadrático Médio (MSE), Erro Absoluto Médio (MAE), Erro Relativo Médio (MRE), Erro Quadrático Médio da Raiz (RMSE) e o coeficiente de determinação ( $R^2$ ).

A comparação entre os modelos permitiu identificar a abordagem mais adequada para previsões, contribuindo para uma maior compreensão da relação entre variáveis experimentais e as doses calculadas por meio de simulações de Monte Carlo. Os resultados apresentados podem auxiliar a equipe médica em relação a dose absorvida nas diferentes posições durante procedimentos na sala de hemodinâmica, e consequentemente diminuir a exposição à radiação ionizante.

Desta maneira, será possível o cálculo em tempo real com o algoritmo apropriado das doses absorvidas pela equipe médica em RI, entendendo que a exposição excessiva à radiação ionizante durante os procedimentos pode ser prevenida ao escolher posicionamentos diferentes e ao usar o EPI corretamente; evitando problemas de saúde à longo prazo e

preservando a saúde dos IOE durante os procedimentos de RI rotineiramente realizados em hospitais.

## 2 Revisão da Literatura

Este capítulo apresenta uma descrição de contribuições relevantes encontradas na literatura sobre predição de doses absorvidas por radiação, uso de AM na física médica, e métodos de validação de modelos preditivos. Discutindo em conjunto com os conceitos fundamentais da radiação, as metodologias tradicionais de cálculo de dose, e o uso crescente de técnicas de AM para aperfeiçoar esses cálculos.

### 2.1 Fundamentos de Radiação Ionizante e Dose Absorvida

A radiação ionizante é amplamente utilizada em procedimentos de radiodiagnóstico e radioterapia, e a dose absorvida por órgãos e tecidos é uma métrica fundamental para avaliar os efeitos biológicos da exposição à radiação ionizante (11). Como o cálculo preciso para previsão da dose absorvida é essencial nestas aplicações médicas, métodos tradicionais, como as simulações Monte Carlo, são amplamente usados para essa finalidade. A precisão dessas simulações ganha cada vez mais importância à medida que métodos, como o AM, são explorados para aprimorar a predição e velocidade do cálculo de doses absorvidas (12).

### 2.2 Métodos de Cálculo de Dose

O cálculo da dose absorvida em procedimentos de hemodinâmica é usado para garantir a segurança tanto dos pacientes quanto dos profissionais envolvidos. Em salas de procedimentos hemodinâmicos, a dose absorvida pelos órgãos e tecidos pode variar devido à complexidade do procedimento, ao tempo de exposição à radiação e à posição em relação à fonte (13, 14).

Uma das principais formas de medir a dose absorvida envolve o uso de dosímetros termoluminescentes (TLDs) ou opticamente estimulados (OSLs). Esses dispositivos são colocados em locais específicos, como no corpo do paciente e da equipe médica, ou em superfícies próximas ao foco da radiação (14). Após o procedimento, esses dosímetros são lidos para determinar a quantidade de radiação absorvida, por meio de curvas de calibração previamente estabelecidas para o equipamento utilizado (13).

Além dos dosímetros, o cálculo de dose também pode ser feito para estimar a dose de entrada na pele utilizando parâmetros técnicos registrados durante o procedimento, como a corrente do tubo de raios-X, a tensão e a distância foco-pele (15).

## 2.3 Aprendizado de Máquina na Física Médica

O *Machine Learning* (ML) tem se tornado um foco de estudo e trabalho cada vez mais presente na física médica, transformando áreas como diagnóstico, planejamento de tratamentos e controle de qualidade em radioterapia e imagens médicas. Seus resultados têm sido relevantes na melhora da precisão, eficiência e a personalização dos cuidados à saúde (16, 17).

Na radioterapia, modelos de AM podem ser usados para prever doses de radiação para tratamentos de câncer, otimizando a distribuição da dose em relação à anatomia do paciente, e às características e localização do tumor. Esses modelos podem auxiliar no ajuste de planos de tratamento a serem mais individualizados com maior rapidez e precisão do que métodos tradicionais, garantindo que a dose seja suficientemente alta para destruir o tumor, mas segura para os tecidos saudáveis circundantes (18).

Além disso, o AM também é aplicado na análise de imagens médicas, como em tomografias e ressonâncias magnéticas, auxiliando no diagnóstico de patologias. A técnica é utilizada para detectar padrões que podem passar despercebidos ao olho humano, ajudando a identificar tumores, fraturas e outras anormalidades com maior precisão (19).

Outra área de aplicação é o controle de qualidade de equipamentos médicos (20), onde o AM pode monitorar e avaliar o desempenho de máquinas como aceleradores lineares e dispositivos de imagem, garantindo seu funcionamento ideal para diagnósticos e tratamentos (19).

A integração de AM na física médica também enfrenta desafios, como a necessidade de dados de alta qualidade e confiáveis. Além do uso ético e seguro de AM em relação à privacidade dos pacientes e à confiabilidade dos sistemas em situações clínicas (16).

## 2.4 Abordagens Tradicionais vs Modelos de Aprendizado de Máquina

A avaliação e predição de doses absorvidas em procedimentos médicos, especialmente em salas de hemodinâmica, têm sido tradicionalmente abordadas teoricamente por métodos estatísticos. Esses métodos apesar de dependerem dos princípios de transporte de radiação ionizante e das características dos equipamentos utilizados, enfrentam limitações em termos de flexibilidade e capacidade de adaptação a condições de movimentação de pessoal na sala (21).

Como os modelos de AM têm capacidade para identificar padrões complexos em grandes conjuntos de dados que podem não ser evidentes nas abordagens tradicionais, seu uso tem sido explorado para melhorar a precisão e a eficiência na previsão de doses

absorvidas. Um dos principais benefícios dos modelos de AM é sua capacidade de se adaptar continuamente a novos dados, melhorando a precisão das previsões ao longo do tempo. Isso é particularmente útil em ambientes dinâmicos, como as salas de hemodinâmica, onde as condições do paciente e os parâmetros do procedimento podem variar significativamente (21).

Enquanto as abordagens tradicionais oferecem um fundamento sólido e documentado para a modelagem de doses absorvidas, os modelos de AM estão emergindo como uma ferramenta poderosa, proporcionando flexibilidade e precisão (22). A combinação dessas metodologias, integrando a robustez das abordagens tradicionais com a adaptabilidade dos modelos de ML, pode beneficiar a área de Física Médica (21).

## 2.5 Validação de Modelos de Aprendizado de Máquina

A validação de modelos de AM permite que os desenvolvedores e pesquisadores avaliem a precisão e a robustez dos modelos analisados. Várias métricas são utilizadas para esse propósito, entre as quais se destacam o Erro Quadrático Médio (MSE), o Erro Absoluto Médio (MAE) e o Erro Relativo Médio (MRE).

O MSE é extensamente utilizado devido à sua sensibilidade a grandes erros, o que tem sido importante em contextos clínicos onde grandes diferenças de valores podem ter consequências significativas. Vários estudos destacam a eficácia do MSE em diferentes áreas de aplicação, desde a previsão de doses em radioterapia até a modelagem de resultados clínicos (23).

O MAE, por outro lado, oferece uma abordagem mais intuitiva, medindo a média das diferenças absolutas, sendo utilizada em pesquisas onde a interpretação clara dos resultados é crucial. Estudos indicam que o MAE é útil na validação de modelos de previsão de dose, pois fornece uma representação mais equilibrada do erro (24).

O MRE fornece uma perspectiva percentual sobre a precisão do modelo, permitindo comparações diretas em diferentes escalas de medição. Essa métrica é relevante em estudos que abordam a variabilidade na resposta de pacientes a tratamentos que utilizam radiação ionizante (25).

Essas métricas ajudam a avaliar a precisão dos modelos, e também desempenham um papel fundamental na seleção do modelo mais apropriado para o problema específico. A literatura sugere que uma combinação dessas métricas pode fornecer uma visão mais abrangente do desempenho do modelo, permitindo uma avaliação mais robusta e uma melhor tomada de decisões na prática clínica (23, 25).

## 2.6 Estudos de Caso

Nesta seção, são discutidos artigos com pesquisas relacionadas à junção de simulação Monte Carlo e modelos de AM, com o objetivo de fornecer uma visão abrangente do estado da arte, identificar lacunas no conhecimento e estabelecer a relevância do tema abordado neste trabalho.

### 2.6.1 Aprendizado de máquina para prever a dose efetiva de nêutrons

Este estudo de caso baseia-se no artigo "*Machine Learning for Predicting Neutron Effective Dose*" de Ali A. A. Alghamdi, publicado em 2024 (26). Este artigo explora como algoritmos de AM podem ser utilizados para prever a dose efetiva de nêutrons, substituindo parcialmente as simulações tradicionais baseadas no método de Monte Carlo. O foco do estudo foi a criação e validação de modelos de AM que estimem coeficientes de conversão de dose (DCCs) com base em dados antropomórficos, utilizando um conjunto de dados composto por diferentes faixas de energia de nêutrons e modelos de órgãos antropomórficos.

O principal objetivo do estudo foi explorar a viabilidade de algoritmos de AM para prever doses em órgãos específicos e a dose efetiva em diferentes cenários de exposição, particularmente em casos onde recursos de computação limitados ou restrições de tempo dificultam o uso extensivo de simulações Monte Carlo. O estudo visa, portanto, demonstrar que os modelos de AM podem fornecer uma alternativa mais rápida e eficiente para previsões de dose, mantendo uma precisão adequada para aplicações práticas na área médica e radiológica.

Os dados foram coletados de simulações de Monte Carlo realizadas anteriormente para calcular os DCCs para várias condições de exposição e diferentes modelos antropomórficos. Os modelos incluídos do *International Commission on Radiological Protection* (ICRP) utilizados neste estudo abrangem o ICRP-110, ICRP-116, o VIP-man e o MIRD (27), além de um modelo específico da população da Arábia Saudita.

As variáveis utilizadas incluem faixas de energia de nêutrons de  $10^{-9}$  a 20 MeV, rótulos dos órgãos, massa dos órgãos, densidade, e coeficientes de dose para diferentes posições de irradiação como anteroposterior (AP), posteroanterior (PA) e lateral (LAT). As informações foram organizadas em 5618 registros com dados de características específicas, como peso e densidade, para modelar doses em condições de irradiação variadas.

Foram selecionados três modelos de aprendizado supervisionado para prever os DCCs: *Extreme Gradient Boosting* (XGB), *Gradient Boosting* (GB) e o *Extra Trees Regressor* (EXTR). Estes modelos foram treinados com dados numéricos e categóricos, com validação cruzada de cinco subconjuntos (*folds*) para garantir a estabilidade e generalização dos modelos. Para cada modelo, 75% dos dados foram utilizados para o treinamento e 25% para o teste, sem otimizações avançadas de hiperparâmetros, evitando potencial

sobreajuste (*overfitting*).

As previsões dos modelos foram avaliadas utilizando três métricas principais como MSE, MAE e o R<sup>2</sup>. Esses indicadores ajudaram a avaliar o desempenho dos modelos em comparação com valores de referência ICRP e as simulações Monte Carlo originais (26).

Os modelos de AM apresentaram bom desempenho para energias médias de nêutrons, mostrando uma diferença percentual média inferior a 9% em comparação com os valores ICRP-116 (27) para LAT. Nas faixas de energia mais baixa, os modelos apresentaram maior variação de até 87% nos valores de dose preditos, enquanto para energias mais altas, a variação foi menor, situando-se entre 3% e 27%.

Os modelos categóricos mostraram desempenho superior em comparação com os modelos baseados exclusivamente em dados numéricos, destacando-se nos casos de órgãos com características físicas distintas. Para a dose efetiva, a maior variação foi observada nas doses PA, enquanto as condições AP e LAT apresentaram variações mais próximas dos valores de referência.

O desempenho dos modelos de AM foi robusto para as condições e faixas de energia de nêutrons utilizadas. No entanto, observou-se que uma ampliação do conjunto de dados poderia aprimorar a acurácia dos modelos e reduzir o risco de sobreajuste.

Os resultados deste estudo mostram que o uso de AM para prever doses efetivas em modelos antropomórficos apresenta resultados promissores e concordância razoável com os valores de referência da ICRP (27). A flexibilidade dos modelos de AM permite que sejam aplicados em condições de simulação variadas e que sejam ajustados para incluir características físicas específicas de uma população, como demonstrado no caso deste estudo saudita.

Entretanto, há limitações importantes a considerar como o tamanho reduzido do conjunto de dados e a ausência de definições específicas nos hiperparâmetros que podem ter impactado a precisão dos modelos em faixas de energia extremas. Além disso, os modelos de AM podem ser sensíveis a irregularidades nos dados, especialmente em simulações que apresentam uma grande quantidade de variáveis e complexidades anatômicas.

Assim, futuros estudos podem beneficiar-se de amostras de dados maiores e da utilização de modelos de AM para predição de doses de fótons, o que aumentaria o poder preditivo e a aplicabilidade do AM em dosimetria. A aplicação de AM na área de dosimetria personalizada é promissora e pode abrir caminhos para métodos mais rápidos e acessíveis em diversas situações clínicas e de pesquisa.



### 2.6.2 Previsão de viés do MCNP usando aprendizado de máquina

Para explorar como modelos AM e códigos MCNP podem se complementar e se refinarem, no artigo "*Using Machine Learning to Predict MCNP Bias*" de Pavel Grechanuk, publicado em 2018 (28), foi explorado o uso de algoritmos de AM para prever o viés em cálculos de criticidade usando o MCNP6 (29).

O viés, ou a diferença entre os resultados simulados e experimentais do parâmetro crítico  $K_{eff}$ , é fundamental para validar a precisão dos cálculos de segurança nuclear. O objetivo principal do estudo foi criar um modelo de AM capaz de prever o viés de forma precisa, fornecendo uma ferramenta que complementa os métodos tradicionais de análise de segurança nuclear e facilita ajustes nos parâmetros críticos sem a necessidade de intervenção manual.

Para desenvolver este modelo, a equipe do estudo utilizou dados detalhados dos vetores de sensibilidade do MCNP6, que capturam como o  $K_{eff}$  responde a diferentes dados nucleares. Cada vetor inclui pares de reações de isótopos específicos, 2.040 no total, compondo uma matriz complexa de dados para modelar o viés em várias condições. Para reduzir a complexidade e o tempo de processamento, foram criadas duas versões dos vetores: uma completa, com 89.760 características, e uma versão simplificada, com 2.040 características, sem a dependência de energia. Essa simplificação permitiu que os modelos fossem treinados de forma mais rápida, mantendo precisão suficiente para análises.

A equipe testou três abordagens de AM: redes neurais artificiais e árvores de decisão, como *Adaboost*, *Random Forest* e *Extra Trees*. Cada modelo foi otimizado através de validação cruzada com 10 *folds*, com o MAE e o RMSE servindo como métricas para avaliar o desempenho. Para os modelos de árvore, a técnica *Adaboost* apresentou os melhores resultados, com um MAE identificando padrões importantes em reações com isótopos de urânio e plutônio, especialmente em faixas de energia intermediária e rápida. Já o modelo *Random Forest* mostrou-se ligeiramente menos preciso, enquanto o *Extra Trees* apresentou desempenho similar ao *Random Forest*, mas com uma maior distribuição das importâncias das características.

As redes neurais apresentaram o menor erro médio entre todos os modelos, alcançando uma precisão com um MAE e RMSE de valores menores. No entanto, a falta de clareza dos processos de decisão das redes neurais limitou a compreensão dos padrões identificados, um contraste com os modelos de *Decision Tree*, que permitiram rastrear diretamente a importância de cada variável. Essa limitação das redes neurais torna seu uso desafiador em contextos onde a interpretabilidade é fundamental, como em aplicações de segurança nuclear.

Os resultados mostram também que casos distintos dos dados de treinamento causaram erros maiores, reforçando a importância de conjuntos de dados equilibrados e

representativos para previsões robustas. Para aprimorar o desempenho, os autores também experimentaram remover casos com grandes desvios, reduzindo o erro médio total e confirmando que uma otimização cuidadosa dos dados de entrada é essencial em contextos de criticidade.

Esse estudo ilustra o potencial do AM em prever o viés dos cálculos críticos do MCNP6, permitindo uma análise de segurança nuclear mais rápida e eficiente. No geral, a pesquisa aponta que a combinação do AM com dados de entrada ajustados pode complementar métodos convencionais de dosimetria e segurança nuclear, abrindo caminho para previsões mais ágeis e confiáveis.

## 2.7 Desafios e Limitações

O uso de técnicas de AM para prever doses absorvidas em dados resultantes de simulações MCNP enfrenta desafios e limitações que impactam precisão e a aplicabilidade dos modelos. Esses desafios estão associados a vários fatores, como o volume de dados disponíveis, sua qualidade e a adequação dos modelos de AM aos problemas de estudados.

A necessidade de grande volumes de dados para treinamento disponíveis surge para evitar *overfitting* e garantir uma generalização robusta das previsões (30). Em aplicações de física médica, incluindo a dosimetria, a coleta de dados experimentais pode ser limitada, o que resulta em um conjunto de dados de tamanho reduzido, podendo comprometer a capacidade do modelo de AM em captar corretamente as relações entre variáveis complexas, como a energia dos fótons e a absorção de dose nos órgãos (31).

Outro desafio a ser considerado é a interpretação dos resultados gerados por modelos de ML, ainda que essas técnicas ofereçam previsões precisas. Visto que quando a relação entre as variáveis de entrada e saída não é totalmente compreendida, isso pode gerar dificuldades em termos de confiabilidade clínica, onde a interpretabilidade dos modelos é essencial para sua adoção em contextos médicos (32).

Apesar do MCNP ser reconhecido por sua precisão em simular processos de transporte de partículas, as diferenças entre as condições de simulação e os cenários reais podem incluir discrepâncias nos parâmetros físicos, como a geometria do corpo humano ou a composição tecidual, o que pode impactar diretamente os resultados das previsões de dose (33). A adaptação e integração entre resultados de simulação e dados reais de modelos de AM para lidar com essas diferenças é um campo de estudo contínuo e necessário para tornar os modelos mais generalizáveis e aplicáveis a diferentes cenários.

Os desafios computacionais associados ao treinamento e à validação dos modelos de AM são uma limitação considerável. O treinamento de modelos complexos de AM exige recursos computacionais significativos quando se trabalha com grandes volumes de dados

simulados. Em alguns casos, a necessidade desses recursos pode limitar a capacidade de realizar experimentos de larga escala ou de ajustar hiperparâmetros de maneira eficiente (34). A otimização de algoritmos e a escolha cuidadosa de métodos de regularização são abordagens que têm sido utilizadas para mitigar esses problemas (35).

O estudo e desenvolvimento de novas técnicas de AM para a atenuar esses desafios e limitações representa um campo crescente em números de pesquisas. A combinação de abordagens híbridas, que mesclam modelos baseados em simulação com ML, pode fornecer soluções mais robustas e aplicáveis em contextos clínicos e de pesquisa.

## 2.8 Tendências Futuras

As tendências futuras nesta área visam não apenas melhorar a precisão dos modelos, mas também torná-los mais facilmente interpretáveis, eficientes e integrados a diferentes aplicações em física médica.

A integração de simulações físicas com AM para criar modelos híbridos que combinam a precisão física do MCNP com a capacidade de predição adaptativa e flexível dos algoritmos de ML, permitirá a criação de sistemas que podem aprender com dados experimentais e se ajustam dinamicamente às condições do mundo real, como durante os procedimentos hemodinâmicos. Um exemplo já estudado são os modelos baseados em aprendizado por reforço, que estão começando a ser utilizados para otimização de planos de tratamento em radioterapia (36). Esses modelos aprendem com interações contínuas com o ambiente de simulação, permitindo uma otimização mais precisa da dose absorvida.

Como mencionado na seção anterior, um dos desafios enfrentados na aplicação de AM em dosimetria é a falta de grandes volumes de dados. Novos avanços, como redes neurais que podem ser treinadas com menos dados, ou técnicas de aprendizado transferível, têm o potencial de melhorar o desempenho dos modelos sem a necessidade de coletar grandes conjuntos de dados, representam outra área de grande interesse (37).

## 2.9 Integração de Dados em Pesquisa

A integração de dados tem sido tema em diversas áreas de pesquisa, especialmente com o aumento da quantidade e diversidade de dados disponíveis em campos distintos. A capacidade de combinar diferentes tipos de dados, como resultados de simulações, medições experimentais e modelos preditivos, pode gerar percepções mais profundas e promover descobertas mais rápidas e precisas.

Na dosimetria e na física médica, técnicas de aprendizado profundo (*deep learning*) (38) têm sido aplicadas para integrar dados heterogêneos, como imagens médicas, históricos

de pacientes e parâmetros simulados. Melhorando a capacidade preditiva e facilitando o desenvolvimento de soluções mais personalizadas em tratamentos médicos (39).

A integração de múltiplas fontes de dados se apresenta como ferramenta para criar sistemas de apoio à decisão em saúde, ajudando a correlacionar informações que, isoladamente, poderiam não ter impacto significativo, mas que, quando combinadas, revelam padrões importantes.

Uma abordagem recente no campo de integração de dados é o aprendizado federado, que permite diferentes instituições compartilharem os padrões obtidos através de seus dados sem a necessidade de expor os próprios dados. Esse método é particularmente importante em áreas que lidam com informações sensíveis onde há questões éticas e de privacidade envolvidas, sendo a área médica um exemplo (40).

Desta forma, as integrações de dados de diferentes fontes e formatos se apresentam como desafios e oportunidades no desenvolvimento de pesquisas. Em aplicações médicas, apontam para melhorias como aumentar a confiabilidade dos modelos e facilitar a aplicação dos resultados da pesquisa em ambientes clínicos reais.

## 3 Fundamentação Teórica

Neste capítulo serão apresentados alguns dos conceitos físicos utilizados durante o desenvolvimento desta tese.

### 3.1 Radiação

Os átomos com núcleos instáveis são chamados de radioativos uma vez que liberam o excesso de energia ou massa para alcançar a estabilidade. Essas emissões são chamadas de radiação (41).

A radiação é definida como a emissão e propagação de energia através do espaço ou da matéria na forma de partículas ou ondas eletromagnéticas (41). Estas ondas são uma forma de propagação de energia transmitida na velocidade da luz por meio de campos elétricos e magnéticos oscilantes, sendo chamadas de radiação eletromagnética (42).

A radiação eletromagnética foi descrita pelas equações do físico e matemático escocês James Maxwell (1831-1879) em 1864, e a demonstração experimental de sua realidade foi apresentada anos depois pelo físico alemão Heinrich Hertz (1857-1894) em 1888. Desde então suas aplicações têm-se disseminado para diversas áreas da sociedade incluindo agricultura e indústria alimentar. Os procedimentos médicos como radioterapia e diagnóstico por imagem são exemplos de aplicações práticas da radiação na medicina. Outra área beneficiada pela radiação é a produção de energia elétrica através da energia nuclear (43).

As ondas eletromagnéticas viajam na velocidade da luz transportando energia e sendo capaz de transferir parte desta energia para a matéria em suas interações. A energia associada à radiação eletromagnética é proporcional à frequência da onda e inversamente proporcional ao comprimento de onda. Desta forma, ondas eletromagnéticas com comprimentos de onda menores têm mais energia (41).

Os exemplos de radiação eletromagnética, de mais baixa a mais alta energia, incluem ondas de rádio, micro-ondas, infravermelho, luz visível, ultravioleta, raios-x e raios gama. Estas divisões estão dentro do chamado espectro eletromagnético e podem ser categorizadas em radiações ionizantes e radiações não ionizantes (41).

A radiação ionizante tem esse nome por ter energia suficiente para que, durante a interação com os átomos, possa remover elétrons e fazer com que o átomo fique carregado ou ionizado. Raios-x, raios  $\gamma$ , partículas  $\alpha$ , partículas  $\beta$  e nêutrons são exemplos de radiação ionizante (41, 44).

### 3.1.1 Radiação Ionizante

A radiação ionizante consiste em partículas subatômicas ou ondas eletromagnéticas que têm energia suficiente ionizar átomos, ou seja, para causar deslocamento de elétrons ligados e quebras de ligações químicas. Os átomos ionizados podem se recombinar ou formar novos compostos químicos, resultando em uma mudança permanente ou duradoura (44).

Esta radiação é capaz de afetar os átomos nos seres vivos ao realizar quebras de fitas de DNA, introduzindo mutações e causando a morte celular. Por isso ela pode representar um risco para a saúde (45).

Os seres humanos estão expostos naturalmente à radiação ionizante. Os principais tipos de exposições naturais são radiação cósmica ou naturais no ambiente. A variabilidade geográfica pode resultar em diferentes níveis de radiação de fundo, porém todos os indivíduos estão sujeitos à radiação de fundo e não existe exposição nula (45).

Outras fontes externas e internas de exposições podem ocorrer como resultado de procedimentos médicos; por exemplo raios-x, tomografia computadorizada e radioterapia (46).

Elementos radioativos emitem radiação ionizante à medida que seus átomos sofrem decaimento radioativo, este é definido como a emissão de energia originada de isótopos instáveis de elementos em rochas, solo e tecidos do corpo, e por reações nucleares que ocorrem no Sol e em estrelas distantes (47).

A maior parte de toda a exposição à radiação de fundo é atribuída à inalação de gás radônio, que é produzido pelo decaimento radioativo do rádio nas rochas e no solo e que, à medida que se infiltra na atmosfera, pode ficar preso e concentrado em ambientes mal ventilados, como habitações e minas subterrâneas (47).

A radiação do radônio e seus produtos de decaimento radioativo consistem principalmente em partículas  $\alpha$ , que têm capacidade muito limitada de penetrar nos tecidos, e podem danificar o DNA celular no pulmão se a fonte radioativa for inalada e depositada nas vias aéreas (47).

Os raios  $\gamma$  e os raios-X, ao contrário, são altamente penetrantes e podem afetar as células mesmo quando a fonte de radiação está fora do corpo (47).

A radiação ionizante é amplamente utilizada em diversas áreas da sociedade por apresentar benefícios significativos ao ser humano e ao meio ambiente como medicina, energia nuclear, agricultura e indústria (44, 48, 49).

## 3.2 Radiação Ionizante na Medicina

Os seres humanos podem ser expostos à radiação ionizante circunstancialmente tal como em casa ou em locais públicos, e ocupacionalmente em seus locais de trabalho ou em um ambiente médico, no caso de pacientes, cuidadores e voluntários. Embora altas doses de radiação ionizante possam ser prejudiciais à saúde humana, radiação e materiais radioativos são usados de forma controlada diariamente em ambientes médicos para auxiliar diagnósticos (50).

A radiação ionizante pode ser utilizada na obtenção de imagens médicas, como no caso dos exames de raio-X. Neste caso, os feixes são direcionados para uma parte específica do corpo, criando uma imagem digital ou filme que mostra as estruturas dentro dessa área, como ossos, tecidos e órgãos. Estas imagens são úteis para complementar diagnóstico ou orientar o tratamento de um paciente (50).

As práticas e equipamentos de radiação médica são regulamentados por programas estaduais e federais para garantir a eficácia de sua segurança. Além do radiodiagnóstico, a radiação ionizante é usada na medicina de duas outras maneiras como a medicina nuclear, que utiliza substâncias radioativas introduzidas no paciente para diagnóstico ou tratamento; e a radioterapia, que usa fontes de radiação ionizante para tratar ou aliviar os sintomas do câncer, por exemplo (50).

A apesar da radiação ionizante ter o potencial de danificar o DNA celular, as células usualmente conseguem se reparar das pequenas quantidades de radiação presentes nos procedimentos de radiodiagnóstico (51).

Regularmente, os benefícios de diagnosticar ou tratar problemas de saúde com radiação ionizante superam esses riscos. Esses procedimentos fornecem radiação para a área necessária para se obter imagem desejada, usando a menor quantidade de radiação necessária para criar uma imagem de boa qualidade (51).

Porém, quando a exposição à radiação é frequente, o risco de desenvolver problemas de saúde ao longo do tempo aumenta proporcionalmente à exposição (51).

O dano da radiação aos tecidos e/ou órgãos depende da dose absorvida que é expressa em uma unidade chamada de Gray (Gy). O dano potencial da dose absorvida depende do tipo de radiação e da radiosensibilidade de diferentes tecidos e órgãos (51).

Para levar em consideração estes fatores, outra grandeza é empregada, a dose efetiva ( $E$ ). O sievert ( $Sv$ ) é a unidade de dose efetiva, que leva em consideração o tipo de radiação e a sensibilidade dos tecidos e órgãos. É uma maneira de medir a radiação ionizante em termos do potencial de causar danos (50, 51).

Além de certos limites, a radiação pode prejudicar o funcionamento dos tecidos e/ou órgãos e pode produzir efeitos agudos, como vermelhidão da pele, perda de cabelo,

queimaduras por radiação ou síndrome aguda da radiação. Esses efeitos são mais graves em doses mais altas e taxas de dose mais altas (51).

Se a dose de radiação for baixa e/ou for entregue por um longo período de tempo, o risco é substancialmente menor porque há uma maior probabilidade de reparação do dano. Porém, existe o risco de efeitos a longo prazo que podem levar anos ou mesmo décadas para aparecer, como o câncer (52).

Efeitos desse tipo nem sempre ocorrerão, mas sua probabilidade é proporcional à dose de radiação. Esse risco é maior para crianças e adolescentes, pois são significativamente mais sensíveis à exposição à radiação do que os adultos (52).

Na medicina, a radiação ionizante apresenta benefícios significativos, tais como maior rapidez e eficácia em procedimentos médicos, o que tornou seu uso na área fundamental e rotineiro no tratamento de pacientes. Esta radiação tem suas aplicações em diversas áreas como radiologia diagnóstica, RI, radioterapia e medicina nuclear (53).

### 3.2.1 Radiologia Intervencionista

A RI refere-se a uma gama de técnicas que dependem do uso de orientação por imagem radiológica como raios-X, ultra-som, tomografia computadorizada (TC) ou ressonância magnética (RM) para orientar procedimentos cirúrgicos minimamente invasivos que diagnosticam, tratam e curam muitos tipos de condições (54).

Esta técnica pode ser usada no lugar da cirurgia em alguns casos, por ser uma alternativa minimamente invasiva à cirurgia aberta e laparoscópica, e eliminar a necessidade de hospitalização. A grande maioria dos procedimentos pode ser realizada sob anestesia local ou sedação, com apenas alguns casos complexos que requerem anestesia geral (54).

A RI existe há muitos anos, com o primeiro procedimento realizado em 1964 por Charles Dotter, que dilatou o principal vaso sanguíneo da perna. O procedimento permitiu que mais sangue chegasse ao pé, o que auxiliou na cicatrização sem a necessidade de cirurgia (55).

A RI surge como uma alternativa à cirurgia convencional em algumas situações específicas por ser menos invasiva, os períodos de recuperação serem mais curtos e, para muitos tipos de intervenções, a taxa de complicações ser menor. Os pacientes que teriam dificuldades para resistir a todo o processo de uma cirurgia convencional aberta, ou lesões que não são facilmente acessíveis, têm na RI uma alternativa para seu tratamento (53, 56).

Os radiologistas intervencionistas fazem uma variedade de procedimentos, como

- Angioplastia. O profissional coloca um pequeno cateter com ponta de balão em um vaso sanguíneo, em seguida, infla o balão para abrir uma área de bloqueio dentro do vaso (57).



- Biópsia por agulha. O profissional coloca uma pequena agulha em quase qualquer parte do corpo, guiada por técnicas de imagem, para fazer uma biópsia de tecido. Este tipo de biópsia pode dar um diagnóstico sem cirurgia (57).
- Colocação de stents. O profissional coloca uma pequena bobina de malha (stent) dentro de um vaso sanguíneo no local do bloqueio. O profissional expande o stent para abrir o bloqueio (58).
- Inserções de cateteres. O profissional coloca um cateter em uma grande veia para administrar medicamentos quimioterápicos, nutrição ou hemodiálise. O profissional também pode colocar um cateter antes de um transplante de medula óssea (58).

As vantagens bem reconhecidas dessas técnicas minimamente invasivas incluem riscos reduzidos, internações hospitalares mais curtas, custos mais baixos, maior conforto, convalescença e retorno ao trabalho mais rápidos. A eficácia do tratamento é muitas vezes melhor do que com os tratamentos tradicionais (59).

Os seres humanos não são a única espécie a se beneficiar da RI. Os cirurgiões veterinários também estão recorrendo a técnicas de intervenção (60).

Esses procedimentos de intervenção radiológica são guiados por raios-X e realizados por uma equipe médica que, em casos complexos, podem levar várias horas para serem concluídos. Desta forma, a RI é a maior fonte de exposição dos profissionais de saúde à radiação médica, o que levanta questões sobre proteção dos IOE à radiação ionizante (53, 61).

### 3.2.2 Proteção Radiológica

Os trabalhadores podem ser expostos à radiação ionizante artificial ou material radioativo natural. Para protegê-los contra tal exposição, algumas medidas concretas podem ser tomadas. Isso inclui monitoramento regular, equipamento de proteção ou contramedidas, como blindagem. Treinamento, intercâmbio de informações e vigilância sanitária consistente também são fatores importantes para um regime de proteção radiológica ocupacional eficiente. Estas responsabilidades são atribuídas por meio de legislação específica, como por exemplo a RDC Nº 611 da ANVISA (54, 62).

A exposição ocupacional à radiação ionizante pode ocorrer em uma variedade de indústrias, instituições médicas, estabelecimentos de ensino e pesquisa, e instalações do ciclo do combustível nuclear. Níveis adequados de proteção contra radiação dos trabalhadores são essenciais para o uso seguro e justificado de radiação, material radioativo e energia nuclear (54).

Um dos principais objetivos da proteção radiológica consiste em proteger os trabalhadores expostos às radiações ionizantes por motivos ocupacionais, de modo que o número

de pessoas expostas e a probabilidade de ocorrência de exposições potenciais sejam tão baixas quanto possível, e que as doses individuais resultantes dessas exposições sigam o princípio ALARA, ou seja, sejam tão baixas quanto razoavelmente exequíveis, além de não exceder os limites regulatórios (54).

O monitoramento operacional dos IOE é baseado em alguns princípios. Avaliação prévia das condições de trabalho para determinar a natureza e magnitude do risco radiológico e garantir a aplicação do princípio de otimização. Classificação dos locais de trabalho em várias áreas tendo em conta a avaliação das doses anuais previstas, o risco de dispersão da contaminação e a probabilidade e magnitude das exposições potenciais. Classificação dos trabalhadores expostos em categorias de acordo com suas condições de trabalho. Aplicação das normas e medidas de monitorização e controle relativas às diversas áreas e categorias de trabalhadores expostos, incluindo a monitorização individual conforme o caso (54, 63).

E também monitoramento de saúde. O supervisor de radioproteção da instalação deve estabelecer as medidas de proteção aplicáveis para prevenir a exposição em função dos riscos ligados às obras que impliquem exposição às radiações ionizantes. Deve também informar seus trabalhadores expostos sobre os riscos radiológicos associados e as normas e procedimentos de proteção radiológica antes de iniciarem suas atividades. Deve também proporcionar-lhes formação antes do início da atividade e periodicamente (63).

As doses recebidas pelos trabalhadores expostos ao longo de sua vida laboral são registradas em seu histórico de dosimetria individual que deve ser mantido devidamente atualizado e disponibilizado ao trabalhador (63).

A proteção contra radiação ionizante tem o objetivo de reduzir a exposição desnecessária, minimizando os seus efeitos nocivos. A blindagem de radiação física pode ser realizada com diferentes formas de equipamentos de proteção individual (EPI), entre eles os aventais de chumbo, escudos protetores de tireoide e óculos plumbíferos (1).

A medição da exposição cumulativa à radiação ionizante do IOE é outro fator importante na proteção radiológica. A dosimetria é fundamental para conhecer a dose a qual o indivíduo foi exposto e se os equipamentos de proteção individual estão cumprindo seu papel de forma eficiente (64).

### 3.2.2.1 Equipamentos de Proteção Individual

O equipamento de proteção individual (EPI) é uma categoria de objetos projetados para proteger a pessoa que o usa de lesões, infecções e outros perigos, como a radiação ionizante. A maioria das ocupações perigosas tem EPI específicos que os trabalhadores usam para diminuir o risco de lesões (65).

Os EPI's para radiologistas e outros funcionários do departamento de imagem pode

incluir proteção física, luvas, protetor ocular, máscaras, protetores faciais, aventais ou outros itens dependendo das necessidade durante a execução do seu trabalho (65).

O EPI deve ser colocado e retirado nas sequências recomendadas para maximizar a proteção radiológica. No entanto, essas sequências podem variar de acordo com a instituição (65).



Figura 1 – Exemplos de equipamentos de proteção radiológica. Imagem retirada de <https://proteg.net.br/epi-radiologia-conheca-os-principais-equipamentos-de-protecao-radiologica/>. Visto em 29/09/2022.

### 3.3 Dosimetria das Radiações Ionizantes

As doses de radiação recebidas pelos IOE devem ser limitadas e as práticas otimizadas. Este é um requisito legal, estabelecido por uma norma nacional de proteção contra radiação. Portanto, é fundamental avaliar as doses recebidas por eles. O campo de medição de dose é chamado de dosimetria de radiação (66).

A dosimetria de radiação refere-se à medição, cálculo e avaliação das doses absorvidas e a atribuição dessas doses aos indivíduos. É a ciência e a prática que relaciona quantitativamente medidas específicas feitas em um campo de radiação a mudanças químicas e/ou biológicas que a radiação produziria em um alvo (66).

Os primeiros trabalhos sobre o assunto são datados dos últimos anos do século XIX, logo depois que o uso de raios-X foi rapidamente aplicado à área médica. Tanto o sucesso do primeiro tratamento de tumor descrito em 1899 quanto o insucesso em outros procedimentos criaram a necessidade de uma medição quantitativa das radiações incidentes (66).

Doses individuais podem ser avaliadas tanto para exposições rotineiras de trabalhadores quanto durante acidentes radiológicos, quando a exposição à radiação ocorre

inadvertidamente. Também é possível avaliar a dose do órgão por pacientes em tratamento radioterápico, medicina nuclear ou exposições de diagnóstico (66, 67).

Para o cálculo das doses internas recebidas por indivíduos expostos à radiação ionizante, são utilizados modelos matemáticos que descrevem o comportamento metabólico dos radionuclídeos incorporados no corpo humano juntamente com modelos dosimétricos que levam em consideração a radiosensibilidade dos órgãos e tecidos do corpo humano (67).

Como existem dois tipos de exposição à radiação, exposição externa e interna, a dosimetria também pode ser categorizada como dosimetria interna ou externa (67).

### 3.3.1 Dosimetria Interna

A ingestão de material radioativo pode ocorrer por diversas vias, como a ingestão de contaminação radioativa em alimentos ou líquido. Em procedimentos de Medicina Nuclear, a ingestão pode ocorrer pelo meio intravenoso, também por ingestão ou inalação. A medição da radiação interna é chamada de dosimetria interna (68).

A avaliação de dosimetria interna depende de técnicas de monitoramento, bioensaio ou imagem de radiação (68).

### 3.3.2 Dosimetria Externa

A exposição externa é a radiação que vem de fora do corpo e interage com ele de alguma maneira. Neste caso, é analisado predominantemente a exposição a raios gama e partículas beta, uma vez que as partículas alfa, em geral, não constituem risco de exposição externa porque as partículas geralmente não passam pela pele (69).

Como os fótons e partículas beta interagem por meio de forças eletromagnéticas e os nêutrons interagem por meio de forças nucleares, os métodos de detecção e dosimetria são substancialmente diferentes. A fonte de radiação pode ser, por exemplo, um equipamento que produz a radiação como um recipiente com materiais radioativos, ou como uma máquina de raios-X (69).

A dosimetria externa pode ser baseada em medições com um dosímetro, ou inferida a partir modelos matemáticos como a simulação Monte Carlo (70).

### 3.3.3 Grandezas Dosimétricas

As grandezas físicas envolvidas na dosimetria de radiação foram sistematizadas em normas definidas pela *International Commission on Radiation Units and Measurements* (ICRU). O órgão criado em 1925 tem como objetivo desenvolver conceitos e recomendações

para o uso de radiações ionizantes, particularmente no tocante aos efeitos biológicos destas (71).

Nesta subseção serão apresentados conceitos e grandezas dosimétricas definidas na publicação do ICRU (72) e utilizadas durante a construção deste trabalho.

### 3.3.3.1 Dose Absorvida

A dose absorvida ( $D$ ) é uma das grandezas dosimétricas fundamentais na proteção radiológica. Esta grandeza é uma quantidade física mensurável de exposição à radiação que está incluída na dosimetria de radiação.

Matematicamente, a dose absorvida é definida como o quociente da energia média cedida pela radiação ionizante ( $d\bar{E}$ ) pela matéria de massa ( $dm$ ), como mostrado na Equação 3.1:

$$D = \frac{d\bar{E}}{dm}. \quad (3.1)$$

No Sistema Internacional de Unidades (SI), esta grandeza tem a unidade gray (Gy) ou  $[J \cdot kg^{-1}]$  e é válida para qualquer tipo de radiação ionizante e qualquer meio absorvedor. A dose absorvida pode ser medida de modo absoluto através do uso de um aparelho específico como o calorímetro de grafite (73).

### 3.3.3.2 Dose Equivalente

Os efeitos biológicos não são atribuídos apenas à dose absorvida, mas também dependem do tipo e da energia da radiação incidente. Dose equivalente é uma quantidade física para medir o efeito em um tecido ou órgão por diferentes tipos e energias de radiação (74).

Para um determinado tipo e energia de radiação, a dose equivalente é a média da dose absorvida em um tecido ou órgão e ponderada para a qualidade da radiação que é de interesse. O fator de ponderação para este fim é chamado de "fator de ponderação de radiação", que reflete a gravidade dos efeitos biológicos devido a diferentes tipos e energias de radiação (74).

Quando o campo de radiação incidente consiste em diferentes tipos e energias de radiação, a dose equivalente em um tecido ou órgão é igual à soma das doses absorvidas ponderadas.

Essa grandeza é proveniente da dose absorvida, como mostrado na Equação 3.2:

$$H_T = \sum_T w_R D_T, \quad (3.2)$$

onde  $w_R$  é um fator adimensional e se constitui na diferenciação dos pesos de cada tipo de radiação. Para raios X, raios gama e elétrons, radiações ionizantes usadas neste trabalho,  $w_R$  tem valor igual a 1. A unidade do SI para a dose equivalente é o Sievert (Sv).

### 3.3.3.3 Dose Efetiva

Os efeitos biológicos também dependem do tipo de tecido ou órgão que foi irradiado. A dose efetiva quantifica o prejuízo total das exposições a vários órgãos ou tecidos (74).

A dose efetiva é a soma das doses equivalentes ponderadas em todos os tecidos e órgãos do corpo. O fator pelo qual a dose equivalente no tecido ou órgão é ponderada é chamado de "fator de ponderação do tecido", que representa a contribuição relativa desse órgão ou tecido em detrimento total resultante da irradiação uniforme de todo o corpo (74). A unidade de medida da dose efetiva, assim como a dose equivalente, é Sievert (Sv) (74).

Sendo  $w_T$  o fator de ponderação de órgãos devidamente tabelados em (75), o somatório desses produtos é feito para se obter a dose efetiva (72), como apresentado na Equação 3.3:

$$E = \sum_T w_T H_T \quad (3.3)$$

## 3.4 Simulação Monte Carlo

O método Monte Carlo é uma ferramenta de modelagem matemática capaz de representar problemas físicos experimentais no que diz respeito à análise de sistemas complexos, o seu uso para resolver modelos no campo da dosimetria de radiações ionizantes é vasto e frequente (76).

Uma das razões deste amplo uso é sua capacidade de abranger o cálculo de grandezas dosimétricas como a dose absorvida, caracterizando a energia, posição e direção das partículas que atingem um detector ou um determinado órgão dentro de um paciente. Assim, a dose absorvida pode ser calculada diretamente ou realizando cálculos analíticos subsequentes (10).

A Simulação Monte Carlo caracteriza uma classe de algoritmos computacionais que dependem de amostragem aleatória para se obter resultados numéricos. A aplicação desta técnica se baseia em alcançar resultados difíceis de serem determinados devido à interferência de variáveis aleatórias (77). Desta forma, a simulação Monte Carlo foca na repetição constante de amostras aleatórias para atingir resultados específicos.

O método de Monte Carlo é relativamente simples e pode ser aplicado para resolução de problemas com diferentes níveis de complexidade. Em sua execução, valores aleatórios

diferentes são atribuídos à variável e após este processo, os resultados são calculados em conjunto para fornecer uma estimativa (78).

Em comparação com os métodos numéricos convencionais, que partem de modelos matemáticos do sistema físico por meio da discretização de equações diferenciais, resolvendo um conjunto de equações algébricas que muitas vezes são bastante complexas e difíceis de solucionar, a característica essencial do método de Monte Carlo é o uso de técnicas de amostragem para a determinação da solução de um problema (78).

A simulação recebe o nome Monte Carlo em referência ao popular cassino em Mônaco, uma vez que os resultados aleatórios são centrais tanto para jogos de roleta, dados e caça-níqueis como para técnicas de modelagem. O método foi aprimorado pelo matemático Stanislaw Ulam que compartilhou sua ideia com o também matemático John Von Neumann. Os dois são famosos por seu trabalho no Projeto Manhattan (77).

### 3.4.1 Na Física Médica

As diferentes técnicas utilizadas de simulação Monte Carlo na Física Médica contribuíram para o desenvolvimento de ferramentas sofisticadas de cálculo de diferentes doses de radiação. A crescente disponibilidade de redes e computadores em hospitais, e a existência de códigos públicos bem documentados e apoiados, certamente ampliaram o número de aplicações científicas e comunicações do método (79).

A principal aplicação de Monte Carlo atualmente é resolver problemas complexos de transporte de radiação, que não podem ser modelados computacionalmente usando métodos determinísticos ou quando medições experimentais são impraticáveis (80, 79).

Um dos códigos de Monte Carlo mais comumente aplicado em problemas relacionados com Física Médica é o *Monte Carlo N -Particle Transport Code* (MCNP). O código MCNP é mantido por um grupo no Laboratório Nacional de Los Alamos, EUA, e apresenta muitas aplicações além da Física Médica. Ele foi desenvolvido originalmente com o objetivo de estudar o transporte de nêutrons e fótons para cálculos com reatores nucleares. A grande vantagem deste código é o seu pacote de geometria que permite a criação de geometrias bastante complexas (80).

Entre as principais aplicações do método de Monte Carlo em Física Médica destacam-se a avaliação de dose em procedimentos diagnósticos e o cálculo de dose e de outras grandezas de interesse com fontes externas (80, 78).

O uso de Monte Carlo para simular o transporte de radiação, com ênfase especial no transporte de elétrons e fótons visando respostas de dosímetros será a aplicação mais utilizada durante este trabalho.



### 3.4.2 Método Monte Carlo na dosimetria individual

A simulação Monte Carlo é reconhecida como um método essencial para estudar a física da medicina nuclear, radiologia e radioterapia. Os conceitos de energia depositada e dose absorvida são de particular interesse para aplicações de radioterapia e aplicações de imagem envolvendo radiações ionizantes (81).

O método Monte Carlo fornece uma simulação detalhada, onde todas as interações realizadas por uma partícula são conduzidas em sucessão cronológica, fornecendo os mesmos resultados que uma solução rigorosa da equação de transporte (82).

Na dosimetria, o monitoramento do IOE requer uma avaliação precisa da dose absorvida usando um dosímetro como amostra a ser medida. Esta técnica é empregada para vários tipos de radiação, como o uso de fótons, elétrons, prótons e radioisótopos (83).

No código de Monte Carlo, o processo físico é simulado diretamente, sem a necessidade de descrever as equações matemáticas que representam o comportamento do sistema, sendo que o único requisito necessário é que o processo físico possa ser descrito por funções de densidades de probabilidade. Uma vez que as funções de densidades de probabilidade são conhecidas, a simulação de Monte Carlo é realizada por meio da amostragem aleatória destas funções (84, 85).

A história de uma partícula é o conjunto de eventos que ocorre com uma determinada partícula, desde o momento em que ela é emitida pela fonte até o momento em que ela é absorvida ou escapa do sistema (84).

No MCNP, as interações da radiação com a matéria são simuladas por meio de amostragens aleatórias das partículas de fonte externa que caracterizam esse processo físico. Conforme o número de histórias das partículas simuladas aumenta, a qualidade do comportamento médio do sistema melhora; isso resulta da diminuição das incertezas estatísticas das grandezas de interesse (86).

Este método é considerado pela impraticabilidade em se obter a solução exata do problema, e o que se espera uma boa estimativa do valor exato à medida que um número suficientemente grande de amostragens é processado. Isto explica a relação do aumento do uso dessa técnica em conjunto com o avanço tecnológico na área computacional (78, 86).

As amostragens são realizadas através das distribuições de probabilidade conhecidas e que caracterizam os processos referentes aos fenômenos físicos. Como resultado, obtêm-se valores médios que estão relacionados com grandezas físicas de interesse como fluxo de partículas ou dose absorvida (78).



#### 3.4.2.1 Na Radiologia Intervencionista

Os objetos simuladores virtuais baseados em voxel e a simulação de Monte Carlo são aplicados às áreas de cálculos de energia efetiva específica e cálculos de dose devido a fontes externas de radiação. As principais vantagens destes simuladores são o alto nível de detalhamento das estruturas do corpo, a facilidade com que suas dimensões físicas podem ser alteradas, dentre outras (87).

Neste estudo foram aplicadas ferramentas desenvolvidas recentemente nas áreas de computação gráfica e filmes de animação para a criação e modelagem de órgãos, tecidos, esqueletos e corpos humanos em 3D, com base em superfícies de malha poligonal.

Na RI, os objetos simuladores são utilizados para representar os corpos da equipe médica e do paciente durante o procedimento a ser realizado. Desta forma, é possível obter valores, próximos aos experimentais, da dose absorvida dos órgãos de cada indivíduo presente na sala e exposto à radiação ionizante (88).

### 3.5 Modelos de Aprendizado de Máquina

O Aprendizado de Máquina, conhecido como *Machine Learning* (ML), é uma subárea da inteligência artificial que busca desenvolver algoritmos capazes de aprender padrões a partir de dados inseridos, fazendo previsões ou tomando decisões com base nessas informações sem serem programados explicitamente para cada tarefa (89). O AM tem sido utilizado em diversas áreas do conhecimento e se mostrado eficaz em funções de classificação, regressão, detecção de anomalias e otimização (90).

No contexto da física médica e da dosimetria, onde este trabalho está inserido, o AM surge como uma ferramenta promissora para melhorar a agilidade e flexibilidade na previsão de doses absorvidas (91), reduzindo o volume de simulações necessárias computacionalmente intensivas como as realizadas pelo MCNP.

Os algoritmos de AM podem ser categorizados em três tipos, como supervisionado, não-supervisionado e por reforço (92). No modelo supervisionado, o algoritmo é treinado com um conjunto de dados rotulados, onde o resultado desejado já é conhecido e o objetivo é prever essa saída para novos dados (93). Exemplos de algoritmos supervisionados incluem regressão linear, árvores de decisão, redes neurais e máquinas de vetores de suporte (90).

Neste trabalho, o foco está no aprendizado supervisionado, onde são utilizados dados a partir dos parâmetros usados nas simulações MCNP e seus resultados para treinar os modelos, como doses absorvidas em diferentes posições para órgãos e tecidos. A partir dessa base de dados, os algoritmos de AM serão capazes de fazer previsões para novos cenários e condições, aprendendo a relação entre as variáveis de entrada, como tensão e posição do paciente, e as doses simuladas.

Nas subseções seguintes, serão descritos com mais detalhes os modelos de AM utilizados nesta tese, bem como as metodologias de divisão dos dados que são fundamentais para garantir uma avaliação criteriosa do desempenho dos modelos.

### 3.5.1 Divisão dos Dados

Durante o desenvolvimento de modelos de AM, a divisão adequada dos dados é uma etapa importante no processo de modelagem. Essa prática constitui na separação do conjunto de dados disponíveis em diferentes subconjuntos, chamados de subconjunto de treinamento e subconjunto de teste (94).

O subconjunto de treinamento (*training dataset*) é utilizado para treinar o modelo, sendo frequentemente o maior subconjunto. Durante essa fase, o modelo ajusta seus parâmetros internos para minimizar a diferença entre suas previsões e os valores reais, se desenvolvendo a partir das características dos dados. A escolha de um grupo de treinamento representativo é crítica, a qualidade e quantidade dos dados de treinamento é um dos principais determinantes do desempenho do modelo; se ele não refletir bem a variabilidade dos dados, o modelo pode não generalizar os padrões com eficiência (95).

O subconjunto de teste (*testing dataset*) é reservado para avaliar o desempenho do modelo após o treinamento. Ele é um grupo de dados não vistos pelo modelo aplicados após o treinamento para fornecer uma estimativa de como o modelo se comportará sendo aplicado em dados novos. O desempenho no conjunto de teste é frequentemente medido usando métricas como precisão e erro que ajudam a quantificar a eficácia do modelo (96).

Neste estudo, duas maneiras diferentes de separar esses subconjuntos serão utilizadas para avaliar e analisar cada modelo desenvolvido.

#### 3.5.1.1 Divisão Treino/Teste

As boas práticas recomendadas para a divisão treino/teste referem-se primeiramente ao tamanho, comumente usando 70-80% dos dados para treinamento e 20-30% para teste, a Figura 2 ilustra a técnica. Essa proporção pode variar dependendo da quantidade total de dados disponíveis e da complexidade do modelo (97).

A principal razão para a divisão treino/teste é evitar o sobreajuste, conhecido como *overfitting*, um problema onde um modelo se ajusta tão bem aos dados de treinamento que não consegue generalizar para novos dados, como se tivesse memorizado os dados e não se adaptado aos seus padrões. Quando um modelo é sobreajustado, ele pode apresentar alta precisão em dados conhecidos, mas falhar em previsões de dados não vistos (98).

A divisão dos dados deve ser feita de maneira aleatória para garantir que tanto o conjunto de treinamento quanto o de teste sejam representativos da distribuição total dos dados, com o intuito de minimizar o viés na construção e avaliação do modelo (97).

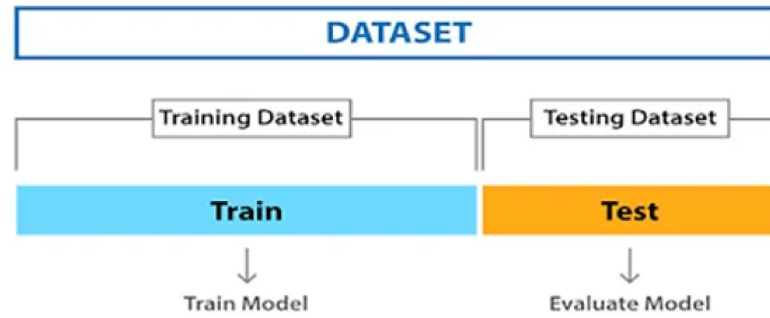


Figura 2 – Configuração de divisão dos dados treino/teste. Disponível em <https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2>. Visto em 24/10/2024.

### 3.5.1.2 Validação Cruzada

A validação cruzada é outra técnica de divisão de dados que permite uma avaliação do desempenho de modelos de AM. Nela os dados são divididos em partes para realizar múltiplos treinamentos e testes (99).

No método K-Fold, utilizado nesse estudo, os dados são divididos em  $K$  *folds*, ou subconjuntos. O modelo é treinado  $K$  vezes, em cada iteração um *fold* é usado como o conjunto de teste (*validation fold*) e os  $K-1$  *folds* restantes são utilizados para treinar o modelo (*training folds*). Após cada iteração, a performance do modelo é avaliada utilizando métricas selecionadas com base no desempenho nos *folds* de teste (100), como apresentado na Figura 3

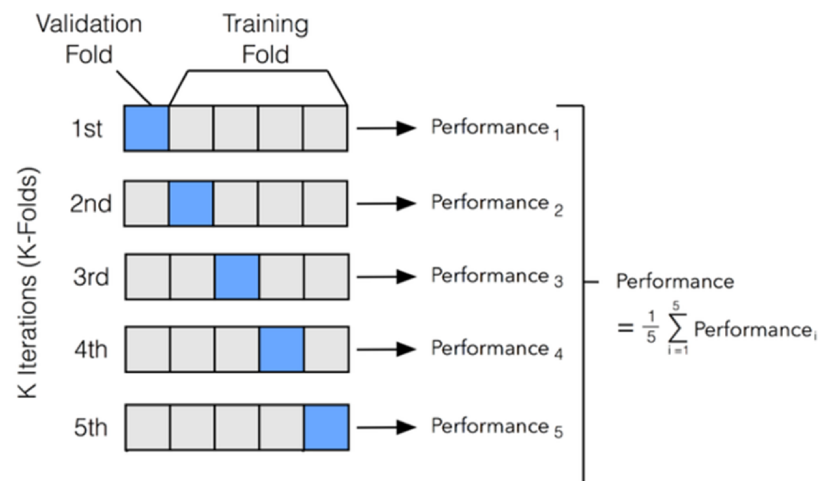


Figura 3 – Configuração de validação cruzada no método *K-fold*. Disponível em <https://medium.com/@ompramod9921/cross-validation-623620ff84c2>. Acessado em 24/10/2024.

### 3.5.2 Modelos Lineares

Os modelos lineares de AM são amplamente utilizados para explorar e descrever a relação entre uma ou mais variáveis preditoras (independentes) e uma variável saída (dependente), ideal para muitos problemas de análise de dados (101). No entanto, à medida que os dados se tornam mais complexos, técnicas de regularização como Ridge e Lasso podem ser necessárias para melhorar a performance e a robustez do modelo, como será abordado nas seções seguintes (102).

As principais características destes modelos são a simplicidade e facilidade de interpretação, uma vez que cada coeficiente indica a relação direta entre a variável preditora e a variável resposta (101). No entanto, apesar de sua simplicidade, os modelos lineares podem não capturar relacionamentos complexos ou não-lineares entre as variáveis, e podem ser sensíveis a se desviam significativamente dos outros valores no conjunto (*outliers*) e à multicolinearidade entre as variáveis preditoras (103).

Os modelos lineares também são computacionalmente eficientes em comparação com métodos mais complexos de AM. Eles podem ser aplicados em uma variedade de situações, desde conjuntos de dados simples até dados de alta dimensionalidade, e são utilizados como referência em comparação de eficiência entre diferentes algoritmos de AM (101).

#### 3.5.2.1 Regressão Linear

Em um modelo de regressão linear simples, que envolve uma única variável preditora, a relação entre a variável dependente é descrita pela equação 3.4 (101):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon \quad (3.4)$$

onde  $Y$  é a variável dependente,  $X$  é a variável independente,  $\beta_0$  é coeficiente linear,  $\beta_1$  é o coeficiente angular, e  $\epsilon$  é o termo de erro, representando a diferença entre o valor observado e o valor teórico explicado pelo modelo.

No caso de um modelo de regressão linear múltipla, com múltiplas variáveis preditoras, a equação 3.4 assume a forma 3.5:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n + \epsilon \quad (3.5)$$

No contexto da equação 3.5, os coeficientes  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  e  $\beta_n$  quantificam o impacto de cada variável preditora  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_n$  sobre  $Y$ .

#### 3.5.2.2 Regressão Linear com Regularização

Quando há múltiplas variáveis ou multicolinearidade, o modelo linear pode se tornar instável, levando a previsões pouco confiáveis ou ao *overfitting*. Para mitigar essas

questões, técnicas de regularização, como Ridge e Lasso, que modificam a função de custo adicionando penalidades sobre os coeficientes de regressão para melhorar a generalização do modelo são aplicadas (101, 104).

A função de custo, no caso da regressão linear, é a soma dos erros quadrados, chamada de Soma Residual dos Quadrados ou *Residual Sum of Squares* (RSS) apresentada na equação 3.6. A função é usada para medir a quantidade de variância entre os valores observados,  $y_i$ , e os valores preditos  $\hat{y}_i$ .

$$RSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.6)$$

#### 3.5.2.2.1 Regularização Lasso

A regularização Lasso, que significa *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator* (Operador Menos Absoluto de Encolhimento e Seleção), é uma técnica de regularização utilizada em modelos de regressão linear para prevenir o *overfitting* e realizar a seleção de variáveis. A técnica minimiza a função de custo e introduz uma penalização L1 à função de custo (105). Desta forma, a nova função de custo se torna:

$$RSS_{Lasso} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^n |\beta_j| \quad (3.7)$$

onde  $\lambda$  é o parâmetro de regularização que controla a magnitude da penalização e  $\sum_{j=1}^n |\beta_j|$  é a norma L1 dos coeficientes  $\beta$ , ou seja, a soma dos valores absolutos dos coeficientes.

Quando  $\lambda = 0$ , o modelo é equivalente à regressão linear simples. À medida que o valor de  $\lambda$  aumenta, os coeficientes são forçados a serem menores, o que torna o modelo mais simples e menos propenso a *overfitting*. A regularização Lasso pode efetivamente eliminar variáveis do modelo, diminuindo sua dimensionalidade ao levar os coeficientes a zero (105).

#### 3.5.2.2.2 Regularização Ridge

A regularização Ridge é uma técnica de regularização utilizada para melhorar o desempenho de modelos de regressão linear, sendo especialmente útil em situações onde há multicolinearidade ou quando se deseja evitar o *overfitting* do modelo.

A função de custo na Ridge Regression é similar à da Lasso, mas com uma diferença na introdução de uma penalização L2 dos coeficientes que penaliza a soma dos quadrados dos coeficientes  $\beta_j$  (106). Com sua função de custo sendo dada pela equação 3.8.

$$RSS_{Ridge} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^n \beta_j^2 \quad (3.8)$$

O efeito da regularização na Ridge é que todos os coeficientes são encolhidos em direção a zero, mas nenhum coeficiente é reduzido exatamente a zero. Isso significa que todas as variáveis permanecem no modelo, mas com menor impacto (106).

Esta técnica é indicada quando as variáveis independentes estão altamente correlacionadas, pois ajuda a estabilizar as estimativas dos coeficientes.

A regularização Ridge geralmente produz modelos mais complexos, pois mantém todas as variáveis, enquanto a regularização Lasso pode levar a modelos mais simples ao eliminar variáveis irrelevantes (105).

### 3.5.2.3 Elastic Net

O Elastic Net é uma técnica de regressão linear regularizada que combina os benefícios das regularizações Lasso e Ridge, resolvendo algumas limitações que esses métodos têm individualmente. Ao combinar esses dois métodos, a técnica pode encontrar um equilíbrio entre a seleção de variáveis e a estabilidade diante da penalização das correlações (107).

O método Elastic Net é usado para dados de alta dimensionalidade ou com multicolinearidade. A sua função de custo é dada pela equação 3.9:

$$RSS_{ElasticNet} = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda(\alpha \|\beta\|_{L1} + (1 - \alpha) \|\beta\|_{L2}^2) \quad (3.9)$$

onde  $n$  é o número de observações e  $\alpha$  é o parâmetro que ajusta o peso entre as penalizações L1 (Lasso) e L2 (Ridge). Quando  $\alpha = 1$ , o modelo Elastic Net se comporta como a regularização Lasso; quando  $\alpha = 0$ , o modelo se comporta como Ridge (35).

## 3.5.3 Modelos de Árvore de Decisão

Os modelos de árvore de decisão são técnicas de AM utilizadas para tarefas de classificação e regressão. Esses modelos representam decisões e suas possíveis consequências de forma gráfica e intuitiva, permitindo uma visualização clara do processo de tomada de decisão ao fazer analogia com uma árvore (108).

As árvores de decisão podem lidar com dados discretos ou contínuos sem necessidade de transformação adicional. Elas são menos sensíveis a *outliers* e podem capturar relações não lineares nos dados (108, 109).

### 3.5.3.1 Árvore de Decisão - *Decision Tree*

A estrutura da *Decision Tree* é hierarquicamente composta por três componentes principais chamados de raiz (*root node*), nós internos ou nós de decisão (*internal nodes*) e folhas ou nós de término (*leaf nodes*). Cada nó interno da árvore representa uma decisão

baseada em uma característica específica, também chamada de atributo, e cada ramo corresponde a uma possível saída ou caminho resultante dessa decisão. O processo continua até alcançar as folhas, que representam a saída final do modelo, sendo classe ou valor predito (110).

A raiz é onde começa a divisão dos dados, ela contém todo o conjunto de dados de entrada e é onde ocorre a primeira decisão com base no atributo mais significativo. Os nós internos são nós de decisão que dividem os dados com base em atributos selecionados de acordo com um critério específico apresentado no modelo (110).

Por fim, as folhas representam o resultado final de uma série de decisões tomadas a partir dos nós anteriores. Para problemas de classificação, uma folha indica uma classe específica; na regressão, a folha contém um valor numérico (110, 111).

Outro termo usado no contexto de árvore de decisão é o conceito de nó pai, que é um nó dividido em sub-nós, e os nós derivados dele são chamados de nós filhos. Além disso, uma ramificação ou sub-árvore é uma sub-seção da árvore inteira (110). Essas expressões estão ilustradas na Figura 4.

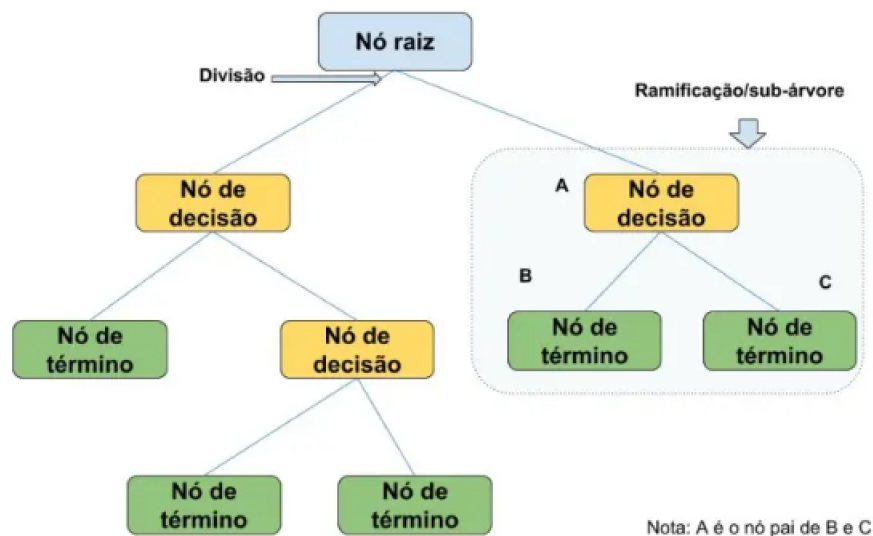


Figura 4 – Ilustração de terminologias relacionadas à árvore de decisão. Disponível em <https://www.vooo.pro/insights/um-tutorial-completo-sobre-a-modelagem-baseada-em-tree-arvore-do-zero-em-r-python/>. Acessado em 25/10/2024.

### 3.5.3.2 Floresta Aleatória - *Random Forest*

O *Random Forest*, chamado de Floresta Aleatória, é um algoritmo de AM baseado em um conjunto de árvores de decisão, onde o modelo cria uma floresta composta por múltiplas árvores de decisão (112); como demonstrado na Figura 5. Cada árvore é construída a partir de um subconjunto aleatório do conjunto de dados original, selecionado através de um processo chamado de *bootstrap sampling* (113).



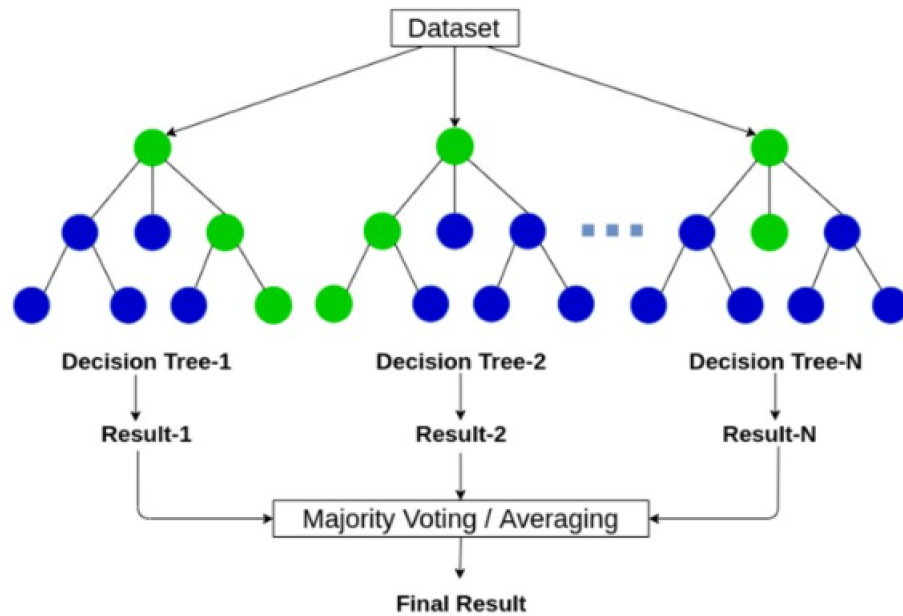


Figura 5 – Ilustração da estrutura do modelo de floresta aleatória. Disponível em <https://pt.linkedin.com/pulse/entendendo-o-algoritmo-random-forest-e-suas-aplica%C3%A7%C3%B5es-julio-rena-aa1yc>. Acessado em 25/10/2024.

O *bootstrap sampling* define que, para cada árvore, amostras aleatórias são retiradas com reposição, o que pode levar a algumas observações aparecerem várias vezes enquanto outras podem ser excluídas (113).

As vantagens do *Random Forest* é que o uso de múltiplas árvores melhora a precisão das previsões, uma vez que os erros de algumas árvores podem ser compensados por outras. Embora o treinamento de múltiplas árvores possa ser computacionalmente intensivo, especialmente em grandes conjuntos de dados (112).

Outro ponto interessante deste algoritmo é fornecer uma medida da importância dos atributos, permitindo a identificação de quais características têm mais influência nas previsões. Ao combinar os resultados de várias árvores, o modelo também é menos propenso a se ajustar aos ruídos do conjunto de dados de treinamento (112).

### 3.5.3.3 Gradient Boosting

O *Gradient Boosting* é uma técnica de treinamento sequencial de modelos, onde cada novo modelo corrige os erros dos modelos anteriores. Desta forma, o modelo combina a previsão de múltiplos modelos, geralmente árvores de decisão, para criar um modelo preditivo robusto e preciso (114).

Para cada iteração, o algoritmo calcula o resíduo, que é a diferença entre as previsões atuais e os valores reais. Esses resíduos representam os erros que o modelo irá corrigir (114), como ilustrado na Figura 6.



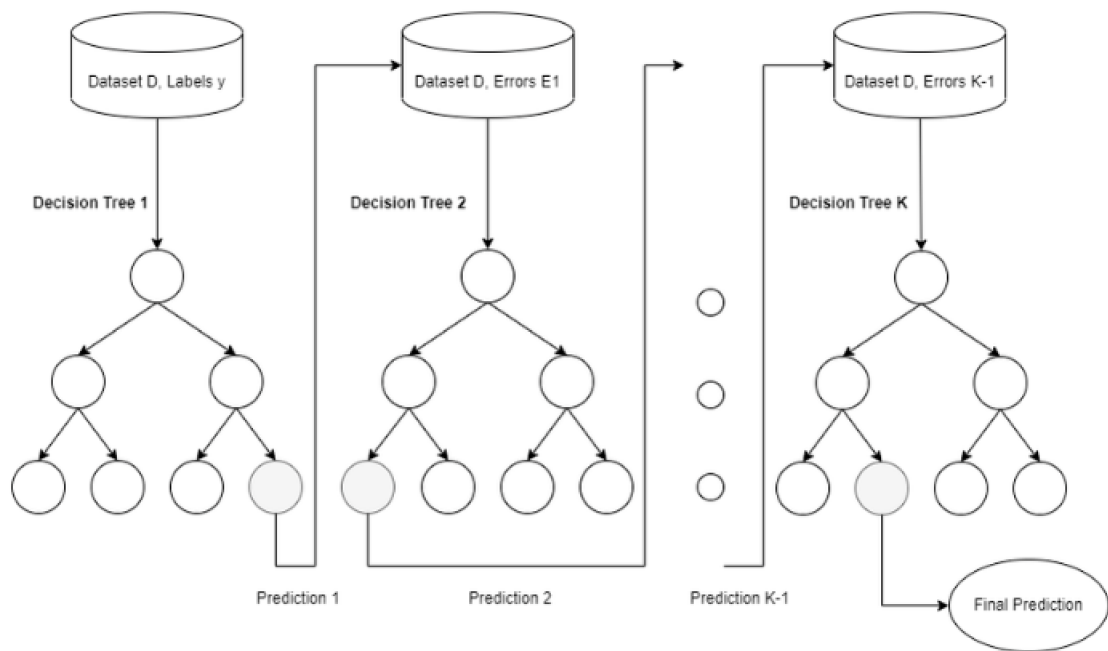


Figura 6 – Ilustração da estrutura geral do algoritmo de *Gradient Boosting*. Disponível em [https://www.researchgate.net/figure/The-general-structure-of-the-gradient-boosting-algorithm-which-is-based-on-boosting-the\\_fig2\\_368703957](https://www.researchgate.net/figure/The-general-structure-of-the-gradient-boosting-algorithm-which-is-based-on-boosting-the_fig2_368703957). Acessado em 25/10/2024.

O treinamento de modelos de *Gradient Boosting* pode ser computacionalmente intensivo e demorado, especialmente em conjuntos de dados grandes. Além disso, ele pode ser sensível a outliers e ruídos nos dados, afetando a qualidade das previsões (114).

#### 3.5.3.3.1 *XGBoost*

O *XGBoost* (*Extreme Gradient Boosting*) é uma implementação otimizada do algoritmo de Gradient Boosting que se destaca por sua eficiência e velocidade em tarefas de aprendizado supervisionado, tanto de classificação quanto de regressão (115).

Uma das principais vantagens do *XGBoost* é a introdução de regularização L1 (Lasso) e L2 (Ridge) no processo de construção das árvores. Isso ajuda a controlar a complexidade do modelo, reduzindo o risco de overfitting. O algoritmo também permite a paralelização no processo de construção das árvores, o que melhora significativamente o tempo de treinamento em grandes conjuntos de dados (115).

Como este modelo oferece muitos parâmetros para ajuste, isso pode tornar a escolha dos hiperparâmetros correta uma tarefa complexa e demorada (116). Além disso, embora tenha regularização incorporada, o *XGBoost* pode ser sensível a ruídos nos dados, especialmente em conjuntos de dados muito grandes ou com muitas variáveis irrelevantes (115).

### 3.5.4 Support Vector Regression - SVR

Os Modelos de Suporte Vetorial de Regressão (*Support Vector Regression* - SVR) são algoritmos comumente usados para problemas de regressão, onde o objetivo é prever um valor contínuo baseado em um conjunto de variáveis independentes. Ao contrário dos modelos de regressão tradicionais, que minimizam a soma dos erros quadráticos, o SVR utiliza um conceito chamado de margem ou tolerância (117).

A margem define uma faixa em torno da função preditiva onde os erros são considerados aceitáveis. Os pontos de dados que ficam dentro dessa faixa não são penalizados, enquanto os que estão fora são considerados como erros (117).

Na função preditiva representada pela equação 3.10,  $\langle w, x \rangle$  representa o produto interno entre o vetor de pesos  $w$  e as características de entrada  $x$ , e  $b$  representa o termo de bias ou intercepto. A partir dessa função, o SVR define uma margem de tolerância  $\epsilon$  em torno de  $f(x)$ , que especifica o quanto os valores previstos podem se desviar dos valores reais sem incorrer em penalidades, ou seja, valores que estão dentro da faixa  $[f(x_i) - \epsilon, f(x_i) + \epsilon]$  não são penalizados (117).

$$f(x) = \langle w, x \rangle + b \quad (3.10)$$

A função de custo do SVR, apresentada na equação 3.11, é composta por duas partes principais, o erro fora da margem e a regularização. O primeiro penaliza os pontos que estão fora da margem de tolerância  $\epsilon$ , buscando minimizar a soma dos erros de previsão que estão além dessa margem, enquanto o segundo controla a complexidade do modelo para evitar *overfitting* (117).

$$\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (3.11)$$

Na equação 3.11,  $\|w\|^2$  representa a norma do vetor de pesos, penalizando a complexidade do modelo,  $C$  é um parâmetro que ajusta o equilíbrio entre a minimização do erro de previsão e a complexidade do modelo, a variável  $\xi_i$  corresponde às distâncias dos pontos fora da margem, que são os erros que o SVR tentará minimizar (117, 118).

Uma característica do SVR é a possibilidade de utilizar funções de kernel, como os kernels linear, polinomial e gaussiano, que permitem transformar os dados em um espaço de alta dimensão. Isso é útil para capturar relações não-lineares complexas, especialmente em dados que não são linearmente separáveis (117).

Durante o treinamento, o SVR identifica os chamados vetores de suporte, que são os pontos que estão próximos ou fora da margem de tolerância e, portanto, exercem maior influência na determinação da função preditiva final. A estrutura do SVR, que

combina uma função preditiva com margem de tolerância, usa regularização para controlar a complexidade e a flexibilidade dos kernels tornando a técnica uma ferramenta robusta para modelagem de relações complexas e previsão em diversos contextos, como finanças, ciência de dados e engenharia (118, 119, 120).

### 3.5.5 Redes Neurais

As redes neurais são um modelo computacional inspirado no funcionamento do cérebro humano, projetadas para reconhecer padrões e resolver problemas complexos em diversas áreas, como reconhecimento de imagens, processamento de linguagem natural e análise de dados. Elas são uma parte fundamental do campo do AM e da inteligência artificial.

Uma rede neural é composta por unidades chamadas neurônios, organizadas em camadas. As três principais são camada de entrada, camada oculta e camada de saída, como ilustrado na Figura 7.

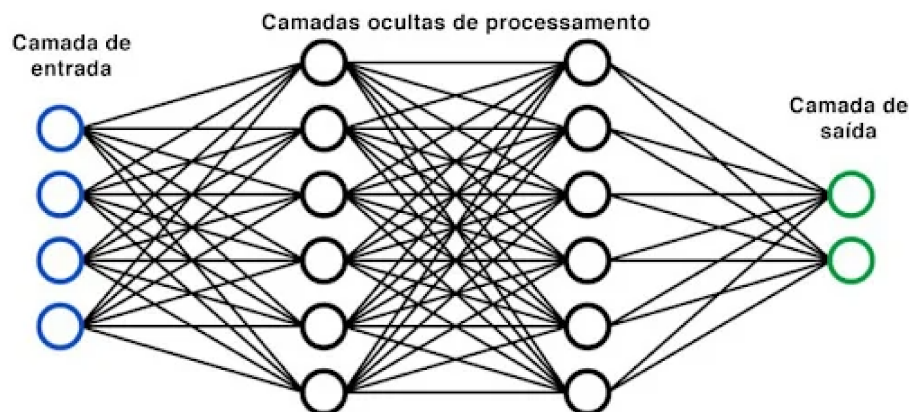


Figura 7 – Ilustração da estrutura de redes neurais. Disponível em <https://www.opencadd.com.br/blog/o-que-sao-redes-neurais>. Acessado em 25/10/2024.

A camada de entrada recebe os dados de entrada e os transforma em um formato utilizável pela rede. Cada neurônio nesta camada representa uma característica ou variável do conjunto de dados.

As camadas ocultas são uma ou mais camadas ocultas situadas entre a camada de entrada e a camada de saída responsáveis por processar as informações recebidas, aplicando transformações não lineares que ajudam a aprender representações complexas dos dados. A camada de saída fornece a predição ou a classificação final da rede.

Existem diferentes modelos de redes neurais. Para análise de dados tabulares em casos de regressão, como no caso deste estudo, o *Multilayer Perceptron (MLP)* é uma opção válida para capturar relações complexas nos dados e será aprofundada nas subseções seguintes.

### 3.5.5.1 Multilayer Perceptron - MLP

O Multilayer Perceptron (MLP) é uma arquitetura de rede neural que se destaca no campo do AM e inteligência artificial oferecendo uma base para a construção de modelos mais complexos. Consiste em uma estrutura de rede composta por várias camadas de neurônios, permitindo a modelagem de relações complexas entre as variáveis de entrada e saída (121).

O número de camadas ocultas e o número de neurônios em cada camada são hiperparâmetros que podem ser ajustados para otimizar o desempenho do modelo.

O funcionamento do MLP baseia-se em dois processos principais. Durante a fase de inferência, os dados de entrada são propagados através da rede, com cada neurônio calculando uma combinação linear das entradas, que é transformada por uma função de ativação para introduzir não-linearidades (121), no caso desse estudo se utilizou da função ReLu.

No treinamento, o MLP utiliza o algoritmo de retropropagação para atualizar os pesos da rede, que envolve a minimização da função de custo, ajustando os pesos com base no gradiente da função de custo em relação aos pesos (122).

A eficácia desse modelo depende de vários fatores, incluindo a escolha da arquitetura, a função de ativação, e a quantidade e qualidade dos dados de treinamento (122).

#### 3.5.5.1.1 Função de Ativação ReLU

A função de ativação ReLU (*Rectified Linear Unit*) é amplamente utilizada em redes neurais (123), e definida matematicamente, sendo  $x$  o dado de entrada, como em 3.12:

$$f(x) = \max(0, x) \quad (3.12)$$

Isso significa que, para qualquer valor de entrada positivo, a saída será igual ao valor de entrada, enquanto para valores negativos a saída será zero. Essa característica simples resulta em um comportamento que permite à rede neural se concentrar nas ativações positivas. A escolha da função ReLU neste trabalho se justifica pela busca e ênfase apenas em resultados positivos, o que é relevante para a previsão de doses absorvidas (124).

O uso da ReLU pode levar a um treinamento mais rápido e eficiente em comparação com funções de ativação tradicionais, possibilitando aos modelos se ajustarem mais rapidamente aos dados (123).

### 3.5.6 AutoML

O AutoML (*Automated Machine Learning*) é uma abordagem que automatiza o processo de desenvolvimento de modelos de AM, facilitando a aplicação dessas técnicas sem necessidade de profunda experiência em AM (125).

O processo tradicional de criação de modelos de AM envolve etapas como a preparação dos dados, seleção de algoritmos e de variáveis, otimização de hiperparâmetros e avaliação de desempenho. Cada uma dessas etapas pode demandar um elevado conhecimento técnico e tempo para experimentação. O AutoML entra como uma solução automatizada, onde técnicas avançadas e algoritmos mais sofisticados são aplicados para encontrar combinações ideais de hiperparâmetros e algoritmos (125).

Apesar de suas vantagens, o AutoML apresenta algumas limitações. A principal é que a automatização completa pode ocultar decisões importantes que afetam a interpretabilidade dos modelos, especialmente em setores que demandam uma alta transparência nos processos, como a área da saúde ou o setor financeiro. Além disso, a utilização de AutoML pode demandar um custo computacional elevado, já que sua estrutura testa múltiplas combinações de algoritmos e hiperparâmetros, tornando o processo intensivo em termos de recursos computacionais (126).

O AutoML representa uma evolução importante no campo do AM, acelerando o desenvolvimento de soluções e reduzindo a barreira de entrada para uso dessas tecnologias. No entanto, o seu uso eficaz requer um equilíbrio entre automação e conhecimento humano, de forma que os resultados sejam interpretados e aplicados de maneira adequada aos problemas específicos (125).

## 3.6 Métricas para Análise dos Modelos

A análise de desempenho de modelos é uma etapa no desenvolvimento de soluções de AM que permite avaliar a precisão, robustez e adequação do modelo ao problema em questão. Escolher as métricas apropriadas depende tanto do tipo de aplicação quanto das especificidades do conjunto de dados e dos objetivos do modelo (24).

Em problemas de regressão, como é o caso deste estudo, onde o objetivo é prever valores contínuos, métricas como o erro médio absoluto (MAE), erro quadrático médio (MSE), erro relativo médio (MRE), raiz do erro quadrático médio (RMSE) e coeficiente de determinação ( $R^2$ ) são amplamente utilizadas. Estas métricas serão descritas nas subseções seguintes (127).

Em adição às métricas de desempenho específicas, é importante também considerar métricas como o tempo de execução e a complexidade computacional, especialmente em aplicações em que os modelos precisam ser implementados em tempo real ou em

dispositivos com limitações computacionais (127).

### 3.6.1 Erro Médio Absoluto - MAE

O Erro Médio Absoluto (*Mean Absolute Error* - MAE) é uma métrica utilizada especialmente em problemas de regressão, uma vez que fornece uma medida da magnitude média dos erros em um conjunto de previsões, expressando esses erros em termos absolutos. Isso significa que essa métrica considera apenas o valor absoluto das diferenças entre os valores previstos e os valores reais, sem se preocupar se o valor previsto é maior ou menor do que o valor real (128).

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (3.13)$$

O MAE é calculado utilizando a fórmula descrita na equação 3.13, onde  $y_i$  representa os valores reais,  $\hat{y}_i$  representa os valores previstos e  $n$  é o número total de observações. O resultado desta métrica é sempre um número positivo e expresso nas mesmas unidades dos dados originais, o que facilita sua interpretação (129).

### 3.6.2 Erro Quadrático Médio - MSE

O Erro Quadrático Médio (*Mean Squared Error* - MSE) também é uma métrica muito utilizada para avaliar o desempenho de modelos de regressão. Essa métrica mede a média dos quadrados das diferenças entre os valores previstos e os valores reais, fornecendo uma medida da magnitude dos erros ao dar mais peso aos erros maiores. Devido a esse peso quadrático, o MSE é útil em aplicações onde é importante penalizar erros grandes (24).

O MSE é calculado pela fórmula na equação 3.14 e sempre retorna um valor positivo, uma vez que os erros são elevados ao quadrado. Isso também significa que erros maiores terão um impacto mais significativo no valor final do MSE do que comparação com métricas como o MAE (24).

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.14)$$

O resultado do MSE é uma medida com unidades elevadas ao quadrado em relação às unidades dos dados originais, o que pode dificultar a interpretação direta. Para resolver isso, uma métrica derivada chamada Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) é usada, pois retorna o erro na mesma unidade dos dados (24).

### 3.6.3 Erro Relativo Médio - MRE

O Erro Relativo Médio (*Mean Relative Error* - MRE) é uma métrica de avaliação de desempenho que diferentemente das métricas MAE e MSE, que medem a diferença absoluta ou quadrática, o MRE calcula o erro médio como uma proporção dos valores reais, proporcionando uma medida de erro relativa (130).

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (3.15)$$

Calculado pela fórmula expressa na equação 3.15, o MRE expressa o erro médio em termos percentuais, o que facilita a interpretação dos resultados ao representar o erro médio como uma proporção dos valores observados. Isso significa que essa métrica é menos sensível à escala dos dados, permitindo a comparação entre conjuntos de dados com diferentes magnitudes (130).

### 3.6.4 Raiz do Erro Quadrático Médio - RMSE

A Raiz do Erro Quadrático Médio (*Root Mean Squared Error* - RMSE) é uma métrica de avaliação de desempenho utilizada para medir o erro médio de previsões de um modelo em relação aos valores observados. Como o RMSE é a raiz quadrada do MSE, ele representa a média das diferenças quadráticas entre os valores previstos e os reais, retornando os erros na mesma unidade dos dados, o que facilita sua interpretação em termos absolutos; como mostrado na equação 3.16 (131).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3.16)$$

O RMSE é comumente utilizado para comparar o desempenho de diferentes modelos, um resultado menor indica um modelo com maior precisão, pois as previsões estão mais próximas dos valores reais. Quanto menor o RMSE, melhor o desempenho do modelo em relação ao conjunto de dados testado. Isso torna essa métrica padrão em competições e comparações de modelos preditivos (131, 132).

### 3.6.5 Coeficiente de Determinação - R<sup>2</sup>

O coeficiente de determinação (*R-squared* - R<sup>2</sup>) é uma métrica estatística que mede a proporção da variabilidade total dos dados que é explicada pelo modelo preditivo. Ele varia de 0 a 1 e indica o quão bem as previsões de um modelo ajustam-se aos dados observados (133).

Um valor de  $R^2$  próximo de 1 indica um ajuste adequado, sugerindo que o modelo é capaz de explicar uma alta proporção da variação dos dados, enquanto um valor próximo de 0 sugere que o modelo explica pouca ou nenhuma variação (134).

O  $R^2$  é calculado com base na razão entre a Soma dos Quadrados do Resíduo e a Soma dos Quadrados Totais, representando a diferença entre a variabilidade explicada e a variabilidade total dos dados. É calculado pela equação 3.17, onde  $\bar{y}$  é a média dos valores reais (134).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.17)$$



## 4 Materiais e Métodos

A infraestrutura empregada no desenvolvimento desta tese foi disponibilizada pela Universidade Federal de Uberlândia, com apoio das agências de fomento FAPEMIG e CNPq.

Neste capítulo serão detalhadas as linguagens de programação utilizadas, bem como o método de análise empregado por meio de simulações computacionais. Esta exposição tem o intuito de facilitar a compreensão dos resultados obtidos e apresentados.

### 4.1 Materiais

A descrição de *software* e da linguagem de programação utilizada neste trabalho serão apresentados nas subseções seguintes.

#### 4.1.1 Software Monte Carlo N-Particle (MCNP)

O software usado para aplicação do método Monte Carlo foi o *Monte Carlo N-Particle* (MCNP 6.2) (29). O código MCNP® pode ser usado para o transporte de uso geral de muitas partículas, incluindo nêutrons, fótons, elétrons, íons e outras partículas elementares. O transporte dessas partículas se dá por meio de uma representação tridimensional de materiais definidos em uma geometria sólida construtiva, delimitada por superfícies definidas pelo usuário de primeiro, segundo e quarto graus (86).

Para simular o transporte de partículas através da geometria definida, as interações físicas de colisão e métodos de redução de variância, números pseudo-aleatórios, são usados para amostrar as funções de densidade de probabilidade subjacentes que descrevem cada um dos processos de eventos. Cada história na simulação usa uma sequência única de números pseudo-aleatórios e, portanto, pode ser considerada independente de outras histórias na simulação. Ao longo da carreira de cada partícula computacional, vários eventos que ocorrem podem ser computados (processo Markoviano) (86).

Dados nucleares e atômicos tabulados e/ou modelos físicos são usados para simular a física em cada colisão que uma partícula sofre durante o processo de transporte. Normalmente, dados nucleares e atômicos tabulados são usados no regime de baixa energia para um subconjunto de partículas de projéteis como elétrons (86).

O código MCNP contém vários registros de energia ou deposição de carga. Estes cálculos e suas incertezas estatísticas são calculadas em todo o conjunto de contribuições independentes de contagem de história. Por isso, as áreas de aplicação que empregam o

código MCNP incluem proteção contra radiação e dosimetria.

O modelo de Monte Carlo foi estabelecido usando o código MCNP-6.2 (29, 135). O *tally* utilizado no MCNP- 6.2 foi o *F6* (MeV/g/source-particle) que registra deposição de energia em cada órgão (29).

#### 4.1.1.1 Objeto Simulador Antropomórfico Virtual

Os objetos simuladores antropomórficos virtuais usados neste estudo foram phantoms humanos adultos femininos e masculinos, denominados FASH (malha adulta feminina) e MASH (malha adulta masculina) (136). Eles foram projetados usando softwares como *MakeHuman* (137), *Blender* (138), *Binvox* (139) e *ImageJ* (140) baseados em atlas anatômicos, observando ao mesmo tempo massas de órgãos recomendado pela Comissão Internacional de Proteção Radiológica (ICRP) para o adulto de referência masculino e feminino no relatório n° 89 (136).

#### 4.1.1.2 Python

A linguagem de programação definida para criar os modelos de AM foi a linguagem Python por oferecer suporte para programação estruturada orientada a objetos e funcional, permitindo criar classes e funções que otimizam o tempo de processamento (141).

A linguagem de programação Python é consistentemente classificada como uma das linguagens de programação mais populares. Uma de suas características mais importantes é comportar várias bibliotecas, deixando sua estrutura dinâmica e atualizada (141).

A versão de Python utilizada neste estudo foi o Python 3.11 por ser mais rápida do que as versões anteriores e ser a mais estável entre as lançadas posteriormente, além de apresentar melhorias importantes em seu desempenho (142).

## 4.2 Métodos

A descrição do método de criação e detalhes dos códigos de programação criados neste estudo, assim como a análise realizada, proporções e bibliotecas utilizadas serão apresentadas nesta seção.

### 4.2.1 Método de Monte Carlo

O código construído no MCNP foi utilizado para simular a sala de hemodinâmica do Hospital de Clínicas da Universidade Federal de Uberlândia. A sala contém dimensões de 7 m × 6 m × 2,55 m; além de um vidro plumbífero, uma porta plumbífera em uma parede, e uma porta plumbífera de mesma dimensão na parede lateral para representar os acessos da equipe médica e pacientes, típico de uma sala de RI.

No centro da sala foi simulada uma mesa de exame e um aparelho de raio-X. Os outros componentes da simulação foram a utilização de três objetos simuladores antropomórficos virtuais MASH, simulando o paciente, o médico e o terceiro representando um membro auxiliar da equipe médica que estão presentes durante os procedimentos.

Os espectros utilizados na simulação foram obtidos com energias máximas de 50 kV, 100 kV e 120 kV. O *tally* utilizado no MCNP 6.2 foi o *F6* que registra deposição de energia nos órgãos de cada indivíduo.

Este processo foi repetido para outros objetos simuladores antropomórficos virtuais como o FASH e mudando o posicionamento do médico e do representante da equipe médica para simular a movimentação real que acontece na sala de hemodinâmica durante diversos procedimentos.

Desta forma, será possível criar o banco de dados com os resultados e inseri-los como treinamento nos modelos ML, para calcular a dose absorvida pelos órgãos dos indivíduos em outras posição não simuladas por questões de dificuldade de processamento.

#### 4.2.2 Pré-processamento dos Dados

O pré-processamento dos dados foi a primeira etapa para garantir a qualidade das informações utilizadas nos modelos de AM, visando tornar o conjunto de dados consistente e adequado para análise e modelagem.

O primeiro passo foi dessa etapa foi a agregação dos resultados, uma vez que cada simulação realizada resultou em um valor de dose absorvida e um erro associado. Esses resultados, juntamente com seus parâmetros relevantes inseridos na simulação, foram agregados em um único arquivo *Microsoft Excel* (143). Essa abordagem facilitou o processo de análise, permitindo uma organização clara e acessível dos dados para as etapas subsequentes.

Os dados foram carregados do arquivo Excel contendo os resultados das simulações. Inicialmente, foram excluídas colunas irrelevantes para a análise, incluindo identificadores, nomes e informações de posicionamento que não contribuem diretamente para a predição das doses. Esse filtro inicial simplifica o conjunto de dados, garantindo que apenas as variáveis relevantes sejam usadas.

Para viabilizar o uso de variáveis categóricas nos modelos de AM, foi feito o mapeamento para valores numéricos. As variáveis de gênero, como sexo do médico executor, do paciente e da equipe médica, foram transformadas de F e M para 0 e 1, respectivamente. A faixa etária dos pacientes foi convertida de Adulto e Criança para 0 e 1. A variável órgão, que identifica o tipo de órgão ou tecido, foi mapeada para valores inteiros, de 0 a 28, permitindo a inclusão desses dados nos modelos.

Essas transformações são essenciais para que os algoritmos de AM, que geralmente requerem variáveis numéricas, possam interpretar essas informações categóricas.

O passo seguinte foi remover todas as linhas contendo valores nulos, assegurando a integridade do conjunto de dados. Uma vez que valores ausentes podem comprometer a qualidade das previsões e causar erros de execução nos modelos.

Em seguida as variáveis independentes (*features*) foram selecionadas considerando características dos indivíduos e da simulação, incluindo fatores como altura, peso, faixa etária, sexo e distância em x e y da equipe médica, do médico executor e do paciente em relação à fonte, além energia da fonte. Já as variáveis alvo (*targets*) consistem nas doses absorvidas pela equipe médica, pelo médico executor e pelo paciente, que são os resultados a serem previstos.

A normalização dos dados foi o último passo aplicado no pré-processamento de dados, uma vez que diferentes escalas nas variáveis podem impactar o desempenho dos modelos. A normalização busca ajustar as variáveis para que tenham uma média e um desvio padrão semelhantes, evitando que variáveis com escalas maiores dominem a análise.

Para isso, foi utilizado a função *StandardScaler* (144) da biblioteca *sklearn* que transforma os dados de maneira que a média de cada variável se torne zero e o desvio padrão de cada variável se torne um. Neste estudo, tanto as *features* quanto as variáveis alvo foram normalizadas, garantindo que todos os dados estivessem em uma escala comparável, facilitando o treinamento e a avaliação dos modelos.

### 4.2.3 Divisão dos Dados

Para avaliar o desempenho dos modelos de predição de doses absorvidas, foram aplicadas duas abordagens de divisão de dados para cada modelo criado: a divisão treino-teste e a validação cruzada. Essas técnicas ajudam a verificar se existem problemas de *overfitting* ou *underfitting* no modelo, assegurando que ele generaliza bem para novos dados.

#### 4.2.3.1 Divisão Treino/Teste

Na divisão treino-teste, utilizou-se a função *train\_test\_split* da biblioteca *scikit-learn* para separar o conjunto de dados em 70% para treinamento e 30% para teste. Essa divisão permite uma avaliação preliminar dos modelos, possibilitando em sequência uma verificação da capacidade preditiva do modelo em uma amostra independente (145).

Esses passos de pré-processamento são formas de assegurar que os dados estejam limpos, consistentes e na forma ideal para a aplicação dos modelos de AM, contribuindo para uma análise mais clara e confiável.

#### 4.2.3.2 Validação Cruzada

Para obter uma análise mais detalhada, aplicou-se a validação cruzada também utilizando a biblioteca do *scikit-learn* (144) e agora através da função *cross\_val\_predict*. Esse método dividiu o conjunto de dados em 10 *folds*, onde cada *fold* é utilizado uma vez como conjunto de teste enquanto os outros 9 *folds* servem para o treinamento.

Esse processo é repetido 10 vezes, garantindo que cada observação seja utilizada tanto para treino quanto para teste, o que resulta em previsões mais estáveis e reduz a variabilidade nas métricas de desempenho. A configuração de 10 *folds* foi mantida consistente para todos os modelos testados, possibilitando uma comparação uniforme entre eles.

#### 4.2.4 Modelos de Aprendizado de Máquina

Cada modelo foi treinado e testado utilizando os métodos de divisão treino-teste e validação cruzada descritos anteriormente. As subseções a seguir detalham cada modelo testado, incluindo sua abordagem, vantagens e considerações específicas para a aplicação no contexto do objetivo deste estudo.

##### 4.2.4.1 Modelos Lineares

Na predição de doses absorvidas, os modelos lineares oferecem uma primeira abordagem para entender a relação entre as variáveis independentes e as variáveis dependentes.

As subseções a seguir apresentam os modelos lineares desenvolvidos neste estudo: a regressão linear simples e as abordagens de regularização Lasso, Ridge e Elastic Net. Cada técnica tem características específicas e oferece distintas vantagens no controle de variáveis e na precisão preditiva.

##### 4.2.4.1.1 Regressão Linear

A construção da regressão linear simples começou com a criação do modelo utilizando a classe *LinearRegression* (146) da biblioteca *sklearn*. Como é necessário prever doses absorvidas pelo médico, paciente e equipe médica simultaneamente, o *MultiOutputRegressor* (147) foi usado por permitir que o modelo de regressão linear se ajuste a várias saídas.

Após definir o modelo, o treinamento foi realizado usando o método *fit*, que ajusta o modelo aos dados de treinamento. Isso significa que o modelo aprende a reconhecer padrões e relações entre as variáveis de entrada e as variáveis alvo com base nesses dados.

Em seguida, o modelo treinado foi usado para fazer previsões sobre o conjunto de teste, avaliando o desempenho do modelo em dados novos, não treinados, simulando o uso

em situações reais. Depois de obter as previsões, o desempenho do modelo foi analisado através de suas métricas.

#### 4.2.4.1.2 Regressão de Lasso

O modelo de regressão Lasso foi inicialmente criado utilizando a biblioteca *MultiOutputRegressor* para lidar com múltiplas saídas simultâneas. Esse modelo foi treinado através da função Lasso do *sklearn* (148) com o conjunto de dados de treinamento, e ajustado com um valor inicial para o parâmetro  $\alpha$ , responsável pela intensidade da regularização.

Durante o treinamento inicial, foram testados diferentes valores de  $\alpha$  para entender seu efeito sobre a performance e o ajuste do modelo. Além disso, foi empregada uma busca por grade (*GridSearchCV* (149)) para determinar o valor ideal de  $\alpha$ , explorando uma faixa de possíveis valores de maneira sistemática. Com o *GridSearchCV* (149), foi possível verificar quais valores resultavam em um melhor desempenho, ajudando a definir o  $\alpha$  mais adequado para o conjunto de dados específico do projeto, e seus resultados foram avaliados a partir de suas métricas.

#### 4.2.4.1.3 Regressão de Ridge

A Regressão Ridge foi implementada utilizando a função Ridge da biblioteca *sklearn* (150), permitindo realizar uma regressão linear regularizada com a penalização L2, que é útil para minimizar a magnitude dos coeficientes, reduzindo a complexidade do modelo e o risco de sobreajuste, especialmente em conjuntos de dados com alta multicolinearidade entre variáveis independentes.

Para ajustar  $\alpha$  ao conjunto de dados, foi utilizada a busca em grade (*GridSearchCV*), que testou diferentes valores para  $\alpha$  e identificou o valor mais apropriado com base em métricas de desempenho. Esse processo ajudou a equilibrar precisão e generalização no modelo, para evitar tanto o *overfitting* e *underfitting*.

Além disso, para tratar o caso de múltiplos alvos, foi empregado o *MultiOutputRegressor* em conjunto com a função Ridge. Isso possibilitou aplicar o modelo de Regressão Ridge para cada variável-alvo de forma independente e simultânea, mantendo a regularização adequada em cada uma.

#### 4.2.4.1.4 Elastic Net

Para a construção do modelo *Elastic Net* (151), utilizou-se a função *ElasticNet* da biblioteca *sklearn*, que combina as penalizações L1 e L2, usadas na regressão Lasso e Ridge, respectivamente. No modelo *Elastic Net*, esses dois parâmetros principais devem ser ajustados:  $\alpha$  e *l1\_ratio*.

Para encontrar a melhor combinação de  $\alpha$  e `l1_ratio`, utilizou-se a busca em grade, definindo diferentes valores para ambos os parâmetros. Esse processo permitiu avaliar várias combinações e selecionar aquelas que resultaram no menor erro quadrático médio, maximizando a precisão das previsões.

Ainda na aplicação do *Elastic Net*, utilizou-se o *MultiOutputRegressor*, que permitiu ajustar o modelo a múltiplas variáveis-alvo de maneira independente e simultânea. E por fim, as previsões finais foram avaliadas através das suas métricas.

#### 4.2.4.2 Modelos de Árvore de Decisão

Nesta seção, será abordado o conjunto de métodos baseados em árvores de decisão, oferecendo um ponto de partida para métodos mais complexos, como o *Random Forest* e o *Gradient Boosting*. A seguir, cada uma dessas técnicas será detalhada, com explicações sobre suas características e funcionamento.

##### 4.2.4.2.1 Árvore de Decisão - *Decision Tree*

No código utilizado no modelo de *Decision Tree* foi empregado a função *DecisionTreeRegressor* (152) do *sklearn*, que é uma implementação de árvore de decisão voltada para problemas de regressão, encapsulado dentro de um *MultiOutputRegressor* para prever múltiplas saídas simultaneamente

O treinamento consistiu em ajustar os parâmetros do modelo para melhor capturar as relações entre as variáveis de entrada e saída. Após o treinamento, o modelo foi utilizado para fazer previsões no conjunto de teste e suas métricas foram avaliadas.

##### 4.2.4.2.2 Floresta Aleatória - *Random Forest*

O modelo de Floresta Aleatória foi criado utilizando a classe *RandomForestRegressor* (153) do *sklearn*, também encapsulado dentro de um *MultiOutputRegressor* para permitir previsões de múltiplas saídas. O treinamento envolveu a construção de várias árvores de decisão a partir de subconjuntos aleatórios dos dados, onde cada árvore contribui com sua própria previsão.

Após o treinamento, o modelo foi utilizado para fazer previsões sobre o conjunto de teste. As previsões foram geradas aplicando os modelos desenvolvidos às entradas do conjunto de teste normalizado e avaliando suas métricas.

##### 4.2.4.2.3 *Gradient Boosting*

O modelo de Gradient Boosting foi criado utilizando a classe *GradientBoostingRegressor* (154) do *sklearn*, encapsulado em um *MultiOutputRegressor* para suportar

previsões de múltiplas saídas. O treinamento do modelo foi realizado com um conjunto de dados normalizado, ajustando suas previsões com base nas características dos dados e nas correções necessárias.

O modelo foi utilizado para gerar previsões no conjunto de teste, aprendendo iterativamente a partir de erros anteriores. Esta técnica teve suas métricas avaliadas posteriormente.

#### 4.2.4.2.4 *XGBoost*

A classe *XGBRegressor* foi usada no desenvolvimento do modelo *XGBoost*, que permite especificar a função de perda a ser otimizada durante o treinamento, esta função também encapsulada pela classe *MultiOutputRegressor*. O parâmetro objetivo da classe *XGBRegressor* foi estabelecido como *reg:squarederror*, adequado para problemas de regressão; o que indica que a função de erro quadrático será utilizada para minimizar a diferença entre os valores previstos pelo modelo e os valores reais observados durante o treinamento do modelo (155).

No treinamento, o modelo aprende as relações entre as variáveis independentes e dependentes, ajustando-se iterativamente para minimizar o erro em suas previsões e tendo suas métricas ao final.

#### 4.2.4.3 *Support Vector Regression - SVR*

No modelo de SVR foi usada a classe *SVR* da biblioteca *SVR* utilizando o *kernel radial-basis function* (RBF), conhecido pela sua habilidade de capturar padrões não lineares complexos (156), e implementado com o *MultiOutputRegressor* para permitir a previsão de múltiplas variáveis dependentes. Além disso, foi feita uma busca dos melhores valores para hiperparâmetros utilizando o *GridSearchCV*, com o objetivo de encontrar os melhor valores de  $C$  e  $\epsilon$ .

O modelo foi treinado a partir dos dados normalizados e, posteriormente, suas previsões foram aplicadas no conjunto de teste. Por fim, seu desempenho foi avaliado através de suas métricas.

#### 4.2.4.4 *Multilayer Perceptron*

No modelo Multilayer Perceptron (MLP), a função *MLPRegressor* da classe *sklearn* foi utilizada junto com a função de ativação ReLU (157), conhecida por sua eficiência em redes profundas ao reduzir problemas como o desaparecimento de gradientes (121). O modelo usando a validação treino e teste configurou duas camadas ocultas, cada uma com 100 neurônios, e utilizou o otimizador Adam, uma escolha comum para a atualização de pesos, ajustando-os de forma adaptativa para melhorar o processo de aprendizado (157).



A configuração `max_iter=500` foi estabelecida para limitar o número máximo de iterações, evitando que o modelo se mantivesse em treinamento prolongado sem melhorias.

Além disso, na validação cruzada foi utilizada uma camada oculta de 100 neurônios e 1000 iterações máximas, para ajustar o aprendizado e garantir maior robustez do modelo. Os dois modelos tiveram suas métricas avaliadas posteriormente.

#### 4.2.4.5 AutoML

Para implementação do código do modelo de AutoML, a biblioteca TPOT (158) foi utilizada através da classe *TPOTRegressor* (159), uma ferramenta que aplica técnicas evolutivas para otimizar pipelines de modelos, escolhendo automaticamente os melhores algoritmos e hiperparâmetros para a tarefa de regressão.

Primeiro, o modelo foi criado utilizando parâmetro o *generations*, onde cinco gerações permitiram a exploração e a combinação de diferentes modelos ao longo do tempo. O *population\_size* especificou que 50 pipelines de modelos foram considerados em cada geração, aumentando as chances de encontrar uma combinação eficiente. O parâmetro *verbosity* controla a quantidade de informações exibidas durante o treinamento, com um valor de 2 fornecendo mensagens detalhadas que permitem o monitoramento do progresso do treinamento. E por fim, *random\_state* foi definido como 42 para garantir a reprodutibilidade dos resultados (159).

Em seguida, se utilizou a classe *MultiOutputRegressor* para permitir que o modelo trate múltiplas saídas simultaneamente. O parâmetro *n\_jobs* foi colocado como `-1` indicando que todos os núcleos de processamento disponíveis devem ser utilizados, acelerando o processo de treinamento.

O modelo foi treinado utilizando o conjunto de dados de treinamento, e automaticamente ajustando os algoritmos e hiperparâmetros com base nos dados fornecidos, buscando otimizar o desempenho preditivo.

#### 4.2.5 Métricas para Análise dos Modelos

Durante o processo de avaliação dos modelos, os dados normalizados foram revertidos para calcular algumas métricas, como o MSE, o MAE e o RMSE. A reversão da normalização é uma etapa importante, porque permite que essas métricas sejam expressas nas mesmas unidades que os dados originais. Isso facilita a interpretação dos resultados e a compreensão do impacto real dos erros nas previsões feitas pelos modelos.

O MSE foi calculado utilizando a função *mean\_squared\_error* da biblioteca *sklearn*, que mede a média dos quadrados das diferenças entre os valores previstos e os reais. Esta métrica fornece uma indicação clara do erro médio ao quadrado, permitindo uma comparação entre os diferentes modelos.

O MAE foi obtido com a função *mean\_absolute\_error* também da biblioteca *sklearn*, que calcula a média das diferenças absolutas entre os valores previstos e reais. Essa métrica foi escolhida por sua simplicidade e capacidade de refletir o erro médio de forma direta, o que facilita a interpretação dos resultados.

Para quantificar a magnitude do erro em termos das unidades originais, foi calculada o RMSE, que foi obtido ao aplicar a função *sqr*t, da biblioteca *numpy* (160), ao MSE. Isso fornece uma métrica que é mais fácil de interpretar, pois expressa o erro na mesma unidade que os dados.

O MRE foi calculado ao dividir as diferenças absolutas entre os valores reais e previstos pelos valores reais, utilizando *where*, da biblioteca *numpy* (160), para evitar divisões por zero. Isso garantiu que a métrica pudesse ser computada mesmo na presença de valores reais que poderiam ser zero.

Por último,  $R^2$  foi calculado utilizando a função *r2\_score* da biblioteca *sklearn*, que fornece uma visão abrangente do quão bem os modelos se ajustam aos dados. Essa métrica foi crucial para avaliar a proporção da variabilidade dos dados que cada modelo foi capaz de explicar.

Essas métricas foram aplicadas a todos os modelos, permitindo uma comparação consistente do desempenho e a identificação de qual abordagem ofereceu os melhores resultados.

## 5 Resultados e Discussões

Neste capítulo, os resultados obtidos a partir do cenário simulado e das previsões realizadas pelos diferentes modelos de AM são apresentados e discutidos. Inicialmente, será descrito o cenário simulado desenvolvido utilizando o código MCNP 6.2 em termos de parâmetros e configurações adotadas, depois os resultados de cada modelo de AM será discutido em detalhe, interpretando as possíveis razões para o desempenho observado e identificando aspectos que influenciam a capacidade preditiva.

### 5.1 Cenários Simulados

Os cenários simulados tiveram como base uma sala de procedimentos hemodinâmicos englobando componentes essenciais, como equipamento de raio-x, mesa do paciente (Fibra de Carbono  $\rho = 1,25 \text{ g/cm}^3$ ), paredes revestidas de concreto Barita Tipo BA ( $\rho = 3,350 \text{ g/cm}^3$ ), porta ( $\rho = 11,35 \text{ g/cm}^3$ ) e janela de vidro plumbífero ( $\rho = 6,22 \text{ g/cm}^3$ ). Todos os componentes presentes na sala foram simulados, com base nas composições químicas e densidades, de acordo com o *Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling* (161).

Os objetos antropomórficos virtuais representando o paciente e os profissionais têm uma estrutura de malha com tamanho de voxel de  $2,4 \text{ mm}^3$ , e apresentam características físicas e composições teciduais de acordo com a anatomia humana de um adulto padrão. MASH3 representa um homem pesando 73 kg, 176 cm de altura e com IMC de  $23,6 \text{ kg/m}^2$ . FASH3 é uma mulher pesando 60 kg, 163 cm e com IMC de  $22,7 \text{ kg/m}^2$  (5, 136)

Os profissionais foram simulados com equipamentos de proteção individual (EPI) essenciais, incluindo protetores oculares, protetores de tireoide e aventais de chumbo, representados na Figura 8(a). As simulações consideraram a movimentação do cardiologista ao redor do paciente, alternando em 8 posições diferentes, correspondentes a situações reais para a realização do procedimento, representadas na Figura 8(b). Também foi considerada a movimentação da equipe médica ao redor do paciente e da sala, em 26 posições diferentes, representadas na Figura 8(c). Os valores para as posições em relação à fonte em x e y estão ilustrados na Figura 8 apresentados na Tabela 1.

Para cada combinação de posições, simulações foram realizadas em três energias: 50 kV, 100 kV e 120 kV, representando níveis de energia comuns usados em procedimentos hemodinâmicos. Esses espectros de energia foram gerados pelo programa de software SRS 78 (162), considerando um tubo com um ângulo de ânodo de  $12^\circ$ , filtração de 4 mmAl e um alvo de tungstênio.

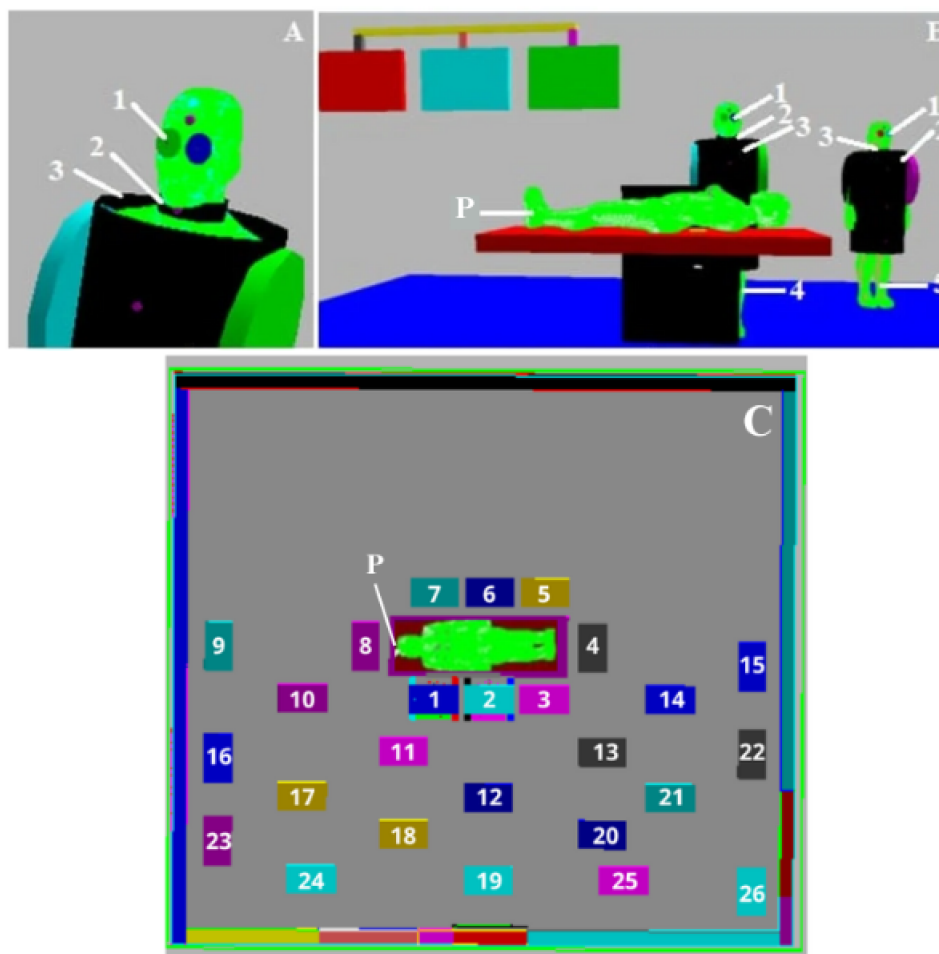


Figura 8 – Visão geral do equipamento de proteção radiológica. (A) Equipamento do médico e equipe médica: 1. Protetor ocular; 2. Protetor da tireoide; 3. Avental de chumbo. (B) Componentes adicionais: 4. Phantom do cardiologista; 5. Phantom da equipe médica; P. Phantom do paciente. (C) Posições da equipe médica (1 a 26).

A fonte radioativa foi posicionada a uma altura de 65 cm acima do solo, 40 cm de distância do paciente e campo de 25 cm  $\times$  25 cm em todas as simulações. O número de históricos de partículas foi 1E9 em cada simulação e o emprego do *tally F6* (MeV/g/partícula-fonte) foi obtido para cada órgão. Um total de 1094 simulações foram realizadas, fornecendo um conjunto de dados abrangente para análise de 29797 linhas dispostas no arquivos Excel.

O menor erro observado foi de 0,001% para a bexiga do médico executor na posição 1, isto pode ser explicado devido à proximidade do órgão em relação à fonte e à proteção adicional fornecida pelo avental e saiote de chumbo presentes na simulação. O maior erro foi registrado para o esôfago na equipe médica na posição 23 sendo de 30%, refletindo uma menor proximidade deste órgão em relação à fonte, bem como seu pequeno tamanho e maior influência de espalhamento de fótons.

Tabela 1 – Coordenadas x e y de posições apresentadas na Figura 8(C), com a origem (0, 0) ancorada na fonte de radiação, posicionada abaixo do tórax do paciente.

| Posição  | X (cm) | Y (cm) |
|----------|--------|--------|
| Paciente | 0      | 0      |
| P1       | 40     | -20    |
| P2       | 40     | 40     |
| P3       | 40     | 100    |
| P4       | 0      | 170    |
| P5       | -40    | 100    |
| P6       | -40    | 40     |
| P7       | -40    | -20    |
| P8       | 0      | -75    |
| P9       | 130    | -235   |
| P10      | 235    | -155   |
| P11      | 235    | 185    |
| P12      | 120    | 305    |
| P13      | 145    | -165   |
| P14      | 145    | 40     |
| P15      | 145    | 235    |
| P16      | 40     | -165   |
| P17      | 40     | 235    |
| P18      | 235    | 40     |
| P19      | 130    | -75    |
| P20      | 130    | 170    |
| P21      | 185    | -75    |
| P22      | 185    | 170    |
| P23      | 0      | -235   |
| P24      | 235    | -235   |
| P25      | 20     | 305    |
| P26      | 235    | 305    |

## 5.2 Modelos de Aprendizado de Máquina

Os resultados obtidos pelos modelos de AM aplicados para a predição de doses absorvidas, assim como as discussões sobre a performance de cada abordagem considerando métricas como o MSE, MAE, MRE, RMSE e  $R^2$  estão apresentados nessa seção.

### 5.2.1 Regressão Linear

Nesta subseção, os resultados obtidos a partir do modelo de regressão linear utilizando a validação de treino e teste estão apresentados a partir de suas métricas na Tabela 2.

Os resultados da análise de regressão linear mostram que este modelo teve um desempenho insatisfatório para o problema em questão, indicando não ser o mais adequado

Tabela 2 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,248843     |
| MSE                  | 0,092867     |
| MRE                  | 77697,683583 |
| RMSE                 | 0,30474      |
| $R^2$                | 0,097031     |

para capturar a complexidade dos dados. As métricas indicam que a simples relação linear não consegue capturar padrões ou variações mais sutis presentes nos dados.

O valor de  $R^2$  de 0,097031 sugere que o modelo explica apenas cerca de 9.7% da variabilidade nos dados de teste, o que é consideravelmente baixo e sugere um ajuste inadequado. Esse baixo valor de  $R^2$  indica que a relação linear entre as variáveis preditoras e a variável de resposta (dose absorvida) não é suficientemente forte.

Além disso, o valor alto do MRE sendo de 77697,68 aponta para uma grande diferença percentual entre os valores preditos e os valores reais. Isso implica que o modelo está cometendo erros significativos em termos relativos, tornando suas previsões pouco confiáveis.

Para ilustrar o desempenho do modelo de regressão linear, dois tipos de gráficos foram gerados em relação ao médico executor à equipe médica. O primeiro é um gráfico que apresenta a dispersão que relaciona os valores reais e preditos, permitindo avaliar a correlação entre as previsões e os dados observados, presente nas Figuras 9 e 10. Neste gráfico, cada ponto representa uma amostra individual, com a proximidade em relação à linha de referência indicando o quão precisas são as previsões do modelo. No entanto, observou-se uma dispersão considerável dos pontos em torno desta linha, indicando inconsistências nas previsões e confirmando a baixa explicação de variância apresentada pelo coeficiente  $R^2$ . Esse resultado visual reforça que o modelo de regressão linear não captura completamente a variabilidade presente nos dados de dose absorvida.

O segundo tipo de gráfico, presente nas Figuras 11 e 12, apresenta uma comparação direta entre os valores reais e os valores preditos, com o eixo x representando o número de amostras, o eixo y exibindo os valores de dose absorvida e a linha azul sendo um guia para observar o comportamento dos valores preditos. Neste gráfico, foram selecionadas amostras espaçadas a cada 750 dados, o que permite uma visualização clara da tendência de erro sem sobrecarregar o gráfico.

A validação cruzada, que tem seus resultados apresentados na Tabela 3, foi usada neste caso para avaliar generalização do modelo, percebendo se os valores se mantêm consistentes nos dois modelos de validação. Os resultados indicam que o modelo apresenta um desempenho consistente em diferentes divisões do conjunto de dados, com métricas

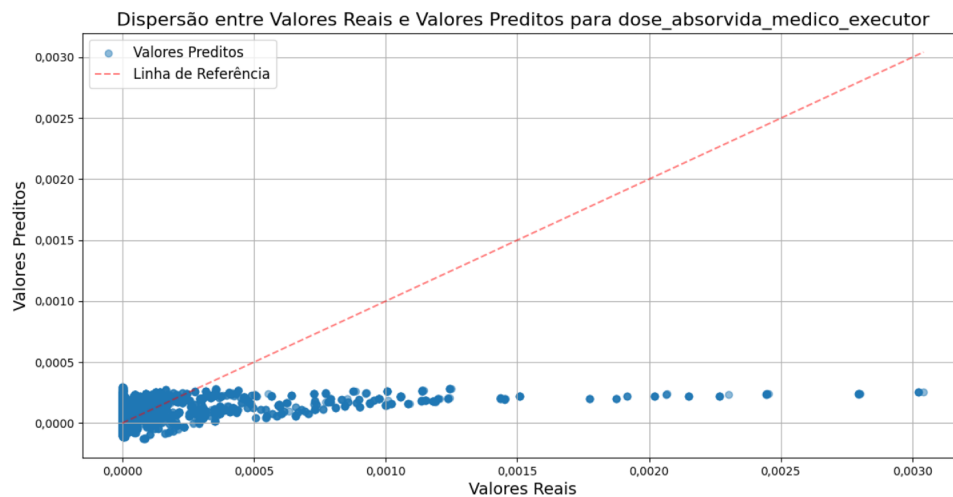


Figura 9 – Gráfico de dispersão para o modelo de Regressão Linear simples entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

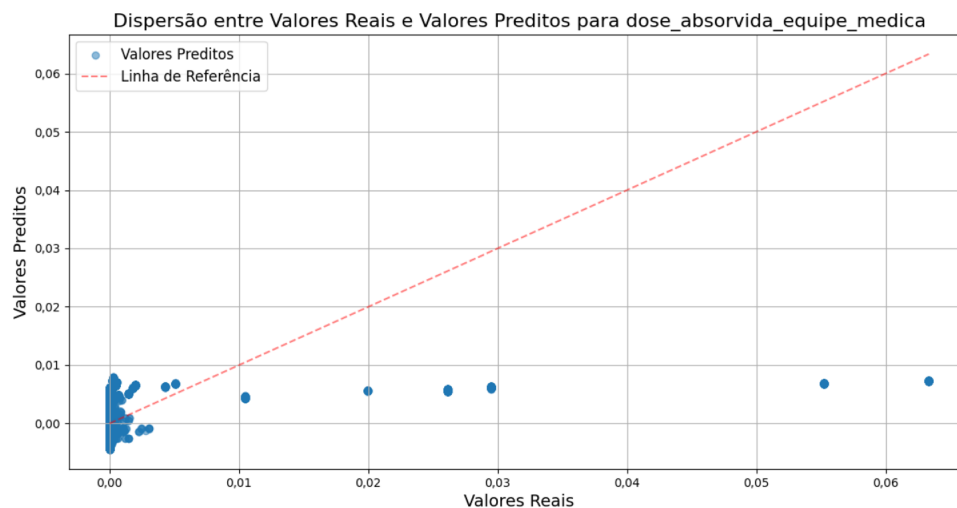


Figura 10 – Gráfico de dispersão para o modelo de Regressão Linear simples entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

que corroboram as observações anteriores.

### 5.2.2 Regressão de Lasso

Os resultados obtidos com a aplicação da regressão Lasso foram analisados após a realização de testes para  $\alpha$ , uma vez que através da técnica de *GridSearch*, foi encontrado que o valor ideal de  $\alpha$  para o caso estudado nesse modelo modelo é 0,001. Esse parâmetro foi escolhido com base na minimização do erro preditivo, equilibrando a penalização dos coeficientes e a capacidade do modelo de se ajustar aos dados. Os valores das métricas obtidos na aplicação do modelo de regressão Lasso foram avaliados por meio de diversas métricas apresentadas na Tabela 4.

Esses resultados indicam que o modelo Lasso apresenta desempenho comparável

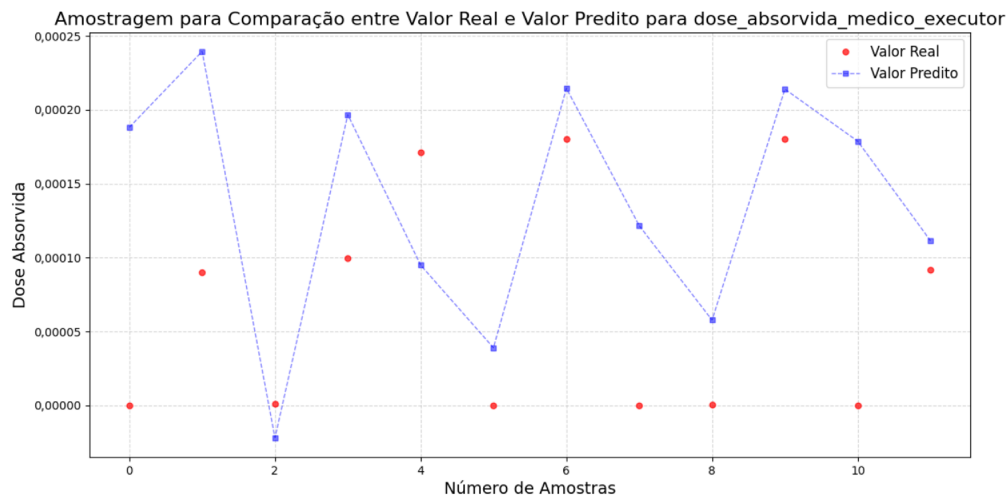


Figura 11 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo Regressão Linear simples

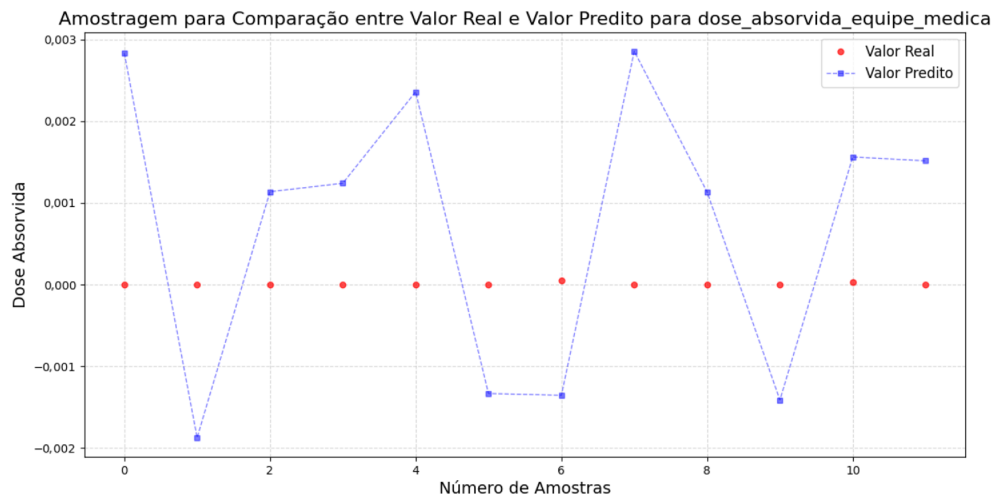


Figura 12 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de Regressão Linear simples

ao modelo de regressão linear simples, com um MSE ligeiramente maior, sugerindo que a regularização impactou a previsão. O  $R^2$  baixo ainda indica que o modelo não captura uma grande parte da variabilidade dos dados, mas a regularização ajudou a manter os erros em níveis um pouco mais baixos que o modelo testado anteriormente.

Assim como na análise anterior, com o modelo de regressão linear, foram gerados gráficos para visualizar o desempenho da regressão Lasso na previsão das doses absorvidas. Os gráficos nas Figuras 13 e 14 ilustram dispersão entre valores preditos e reais; e os gráficos de 15 e 16 mostram a comparação entre os valores reais e preditos pelo modelo.

Esses gráficos evidenciam que, embora o modelo Lasso tenha uma estrutura preditiva, existem diversas instâncias em que ele erra significativamente nas previsões, refletindo uma discrepância entre os valores reais e os previstos.



Tabela 3 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,004691     |
| MSE                  | 0,000104     |
| MRE                  | 76987,794201 |
| RMSE                 | 0,010179     |
| $R^2$                | 0,096408     |

Tabela 4 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear usando regressão Lasso

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,24918      |
| MSE                  | 0,093174     |
| MRE                  | 77946,939645 |
| RMSE                 | 0,305243     |
| $R^2$                | 0,097132     |

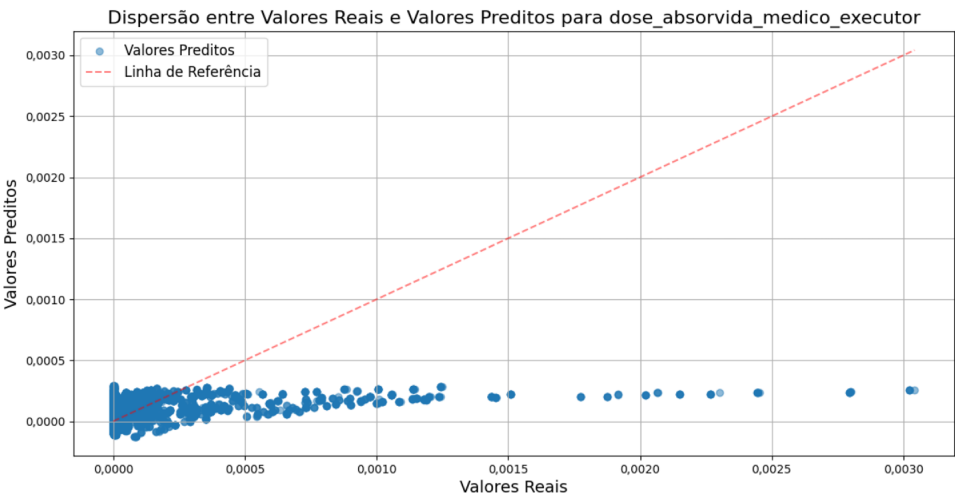


Figura 13 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Lasso entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

A validação cruzada foi realizada para avaliar o desempenho do modelo de regressão Lasso, e os resultados obtidos são apresentados na Tabela 5. Pode-se notar que os valores obtidos na validação cruzada são consistentes com aqueles encontrados durante a fase de treino e teste, indicando que o modelo não apresenta variações significativas em seu desempenho.

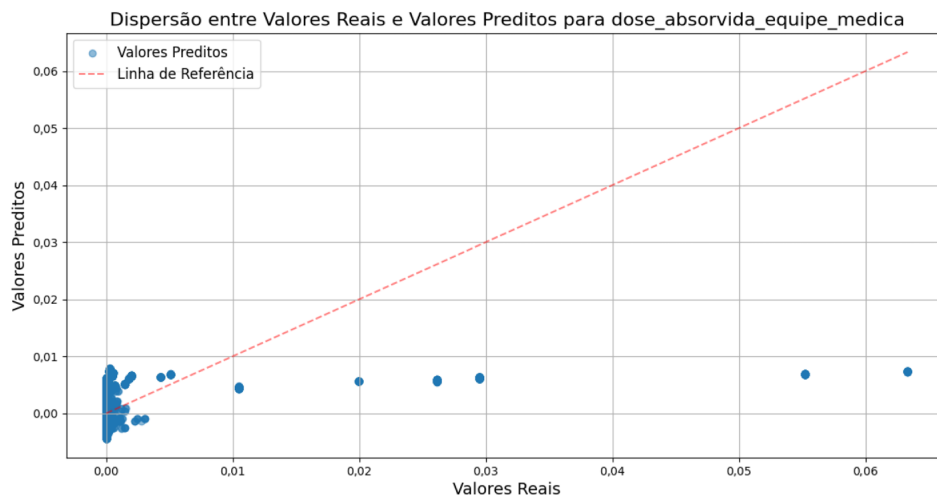


Figura 14 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Lasso entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

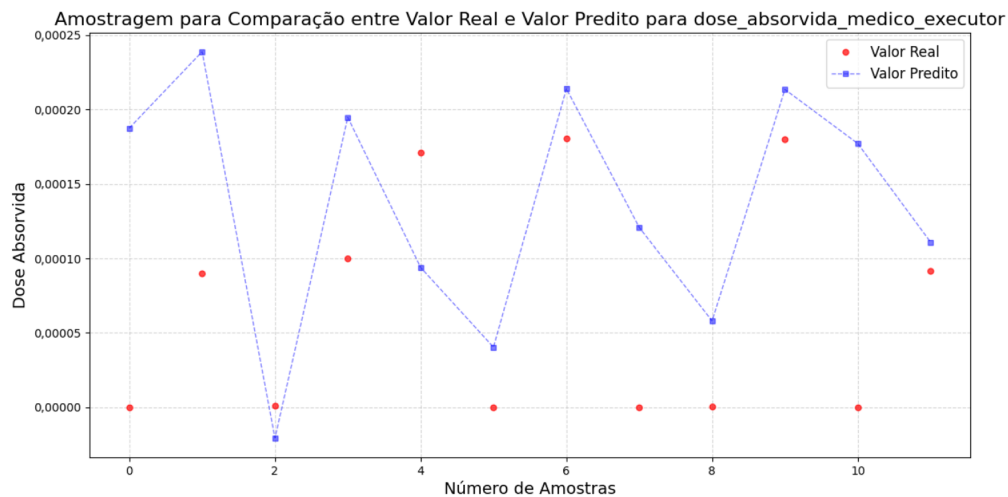


Figura 15 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de regressão linear com regularização Lasso.

### 5.2.3 Regressão de Ridge

Na aplicação do modelo de regressão Ridge, foi realizada uma otimização do parâmetro de regularização  $\alpha$  por meio de um *grid search*, que indicou o valor ideal de 0,5. Esse valor de  $\alpha$  foi então utilizado para avaliar o desempenho do modelo em termos de precisão preditiva nas doses absorvidas. As métricas resultantes dessa análise são apresentadas na Tabela 6.

As métricas de desempenho obtidas indicam que, embora o modelo Ridge apresente desempenho semelhante aos outros modelos avaliados, ele ainda encontra limitações na captura da variabilidade total dos dados, como demonstrado pelo valor de  $R^2$ .

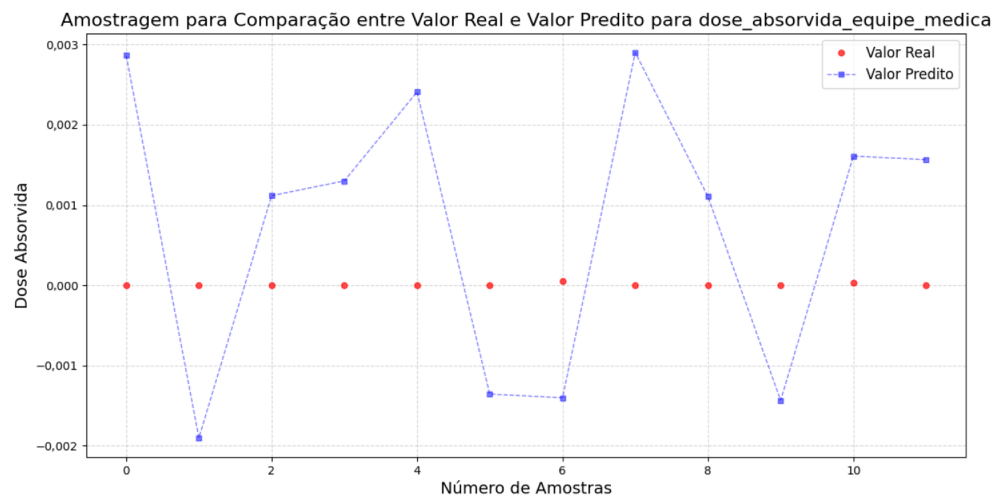


Figura 16 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de regressão linear com regularização Lasso.

Tabela 5 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear com regularização Lasso na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,004686     |
| MSE                  | 0,000103     |
| MRE                  | 76880,719306 |
| RMSE                 | 0,010178     |
| $R^2$                | 0,096491     |

Tabela 6 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear com regularização Ridge

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,250556     |
| MSE                  | 0,094215     |
| MRE                  | 77873,156092 |
| RMSE                 | 0,306945     |
| $R^2$                | 0,097071     |

Além disso, foram gerados gráficos para visualizar o desempenho do modelo Ridge, incluindo gráficos de dispersão dos valores reais e preditos e um gráfico de comparação amostral entre valores reais e previstos para o médico executor e para a equipe médica, presente nas Figuras 17 e 18, e 19 e 20, respectivamente. Esses gráficos mostram que o modelo Ridge tem um comportamento muito similar ao observado nos modelos anteriores, com resultados visuais que não diferem significativamente.

Para avaliar ainda mais a robustez do modelo de regressão Ridge, também foi realizada uma validação cruzada, cujos resultados estão apresentados na Tabela 7. Obser-

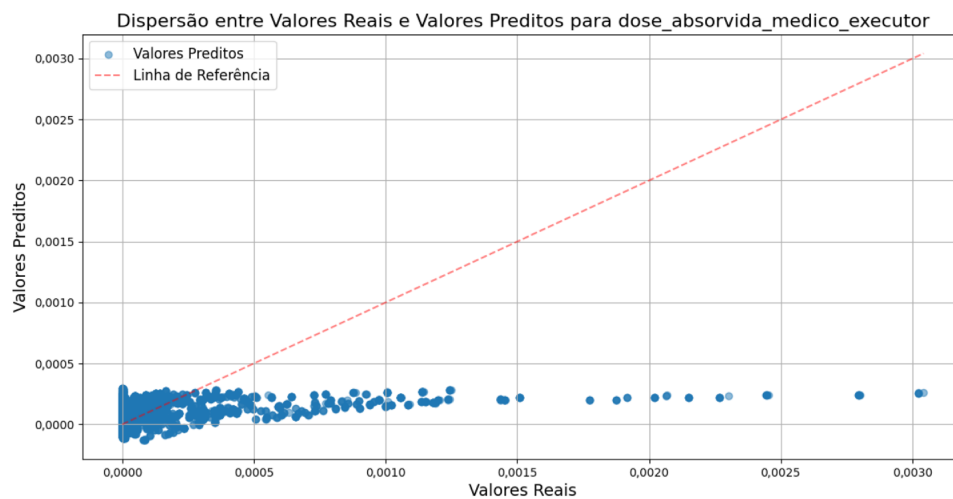


Figura 17 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Ridge entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

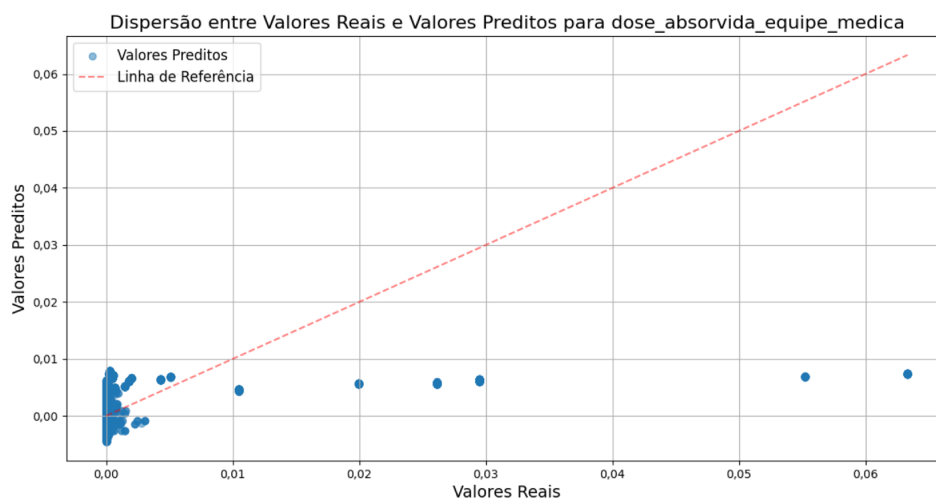


Figura 18 – Gráfico de dispersão para o modelo de regressão linear com regularização Ridge entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

se que esses valores são bastante consistentes com aqueles obtidos na validação de treino e teste, reforçando a estabilidade do modelo Ridge, embora continue indicando uma limitação em capturar toda a variabilidade dos dados.

De modo geral, os resultados obtidos com o modelo de regressão Ridge indicam que, embora o modelo tenha demonstrado consistência entre os conjuntos de treino, teste e validação cruzada, seu desempenho ainda é limitado. Apesar da estabilidade apresentada, o modelo Ridge não se mostrou adequado para alcançar uma boa precisão nas previsões de dose absorvida.

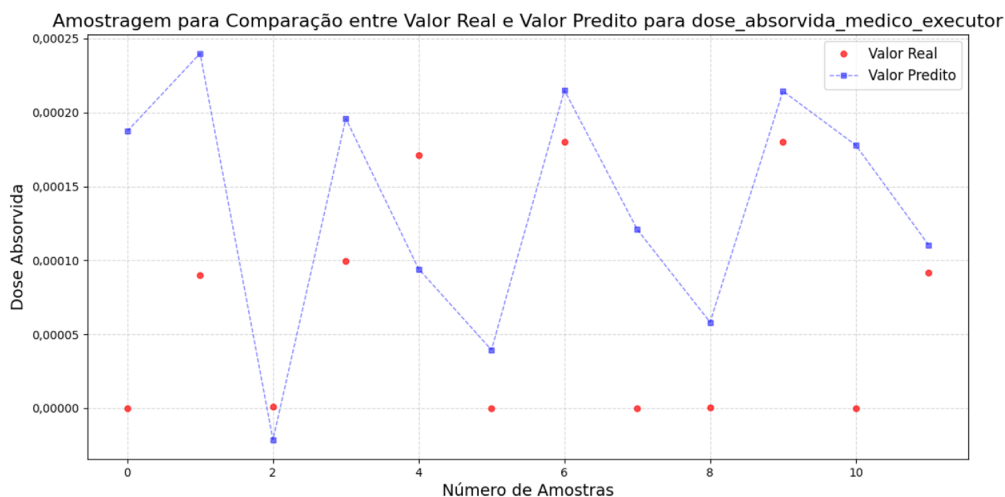


Figura 19 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de regressão linear com regularização Ridge.

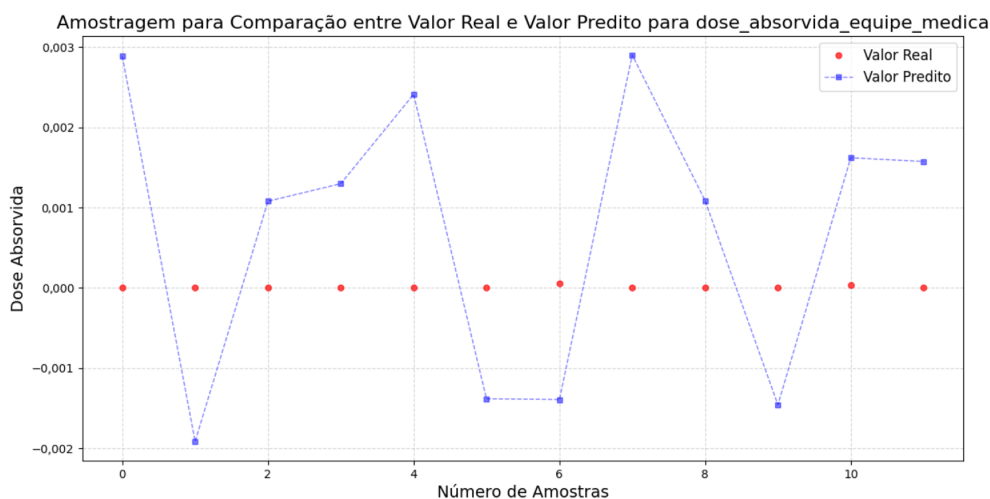


Figura 20 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de regressão linear com regularização Ridge.

#### 5.2.4 Elastic Net

Para a implementação do modelo de regressão Elastic Net, foram utilizados os parâmetros  $\alpha = 0,001$  e  $l1\_ratio = 0,5$ , definidos através de uma otimização por *grid search*. Com esses valores de regularização, o modelo foi aplicado ao conjunto de teste para prever as doses absorvidas.

As métricas resultantes dessa análise, apresentadas na Tabela 8, indicam que o modelo Elastic Net oferece uma precisão preditiva semelhante aos modelos anteriores, mas não oferece uma melhoria substancial em termos de precisão.

Neste modelo, o MAE apresenta um desvio absoluto relativamente baixo entre os

Tabela 7 – Valores de métricas resultantes do modelo de Regressão Linear com regularização Ridge na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,004690     |
| MSE                  | 0,000103     |
| MRE                  | 76916,988461 |
| RMSE                 | 0,010179     |
| $R^2$                | 0,096419     |

Tabela 8 – Valores de métricas resultantes do modelo de Elastic Net

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,249779     |
| MSE                  | 0,093628     |
| MRE                  | 77905,308104 |
| RMSE                 | 0,305987     |
| $R^2$                | 0,097105     |

valores previstos e observados, o MSE reforça essa análise, mas ao penalizar erros maiores de forma mais acentuada, sugere que o modelo apresenta alguns desvios mais significativos. O MRE, no entanto, é extremamente elevado, o que pode indicar instabilidade nas previsões, especialmente em relação aos valores observados mais baixos. Por fim, o coeficiente de determinação sugere que apenas 9,71% da variabilidade total dos dados é explicada pelo modelo, apontando para uma baixa capacidade de ajuste.

Os gráficos resultantes da análise do modelo Elastic Net apresentam praticamente o mesmo desempenho e comportamento em relação aos gráficos gerados para os modelos de regressão anteriores. Os pontos de dispersão, nas Figuras 21 e 22, que representam a relação entre as doses absorvidas previstas e reais para o médico executor e para a equipe médica, revelam que, embora alguns valores preditos se aproximem mais dos reais, o modelo ainda falha em capturar adequadamente a totalidade das variações presentes nos dados.

Embora os valores preditos em comparação com os valores reais indiquem uma correlação mais próxima, presente nas Figuras 23 e 24, ainda erros significativos são evidentes nas previsões. Essa situação sugere que, mesmo com a combinação de penalizações Lasso e Ridge, o modelo Elastic Net enfrenta desafios em sua capacidade preditiva.

A validação cruzada realizada com os mesmos parâmetros forneceu resultados que confirmam a consistência do modelo. As métricas obtidas estão apresentadas na Tabela 9. Esses valores indicam que a performance do modelo permanece estável entre o conjunto de teste e a validação cruzada, com uma leve variação nas métricas de erro.

O Elastic Net proporcionou uma ligeira melhoria em relação aos modelos anteriores,

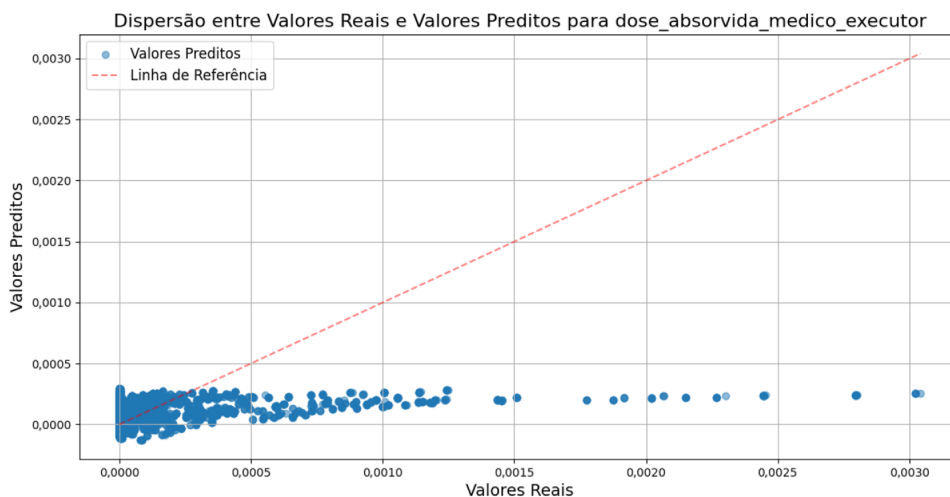


Figura 21 – Gráfico de dispersão para o modelo de Elastic Net entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

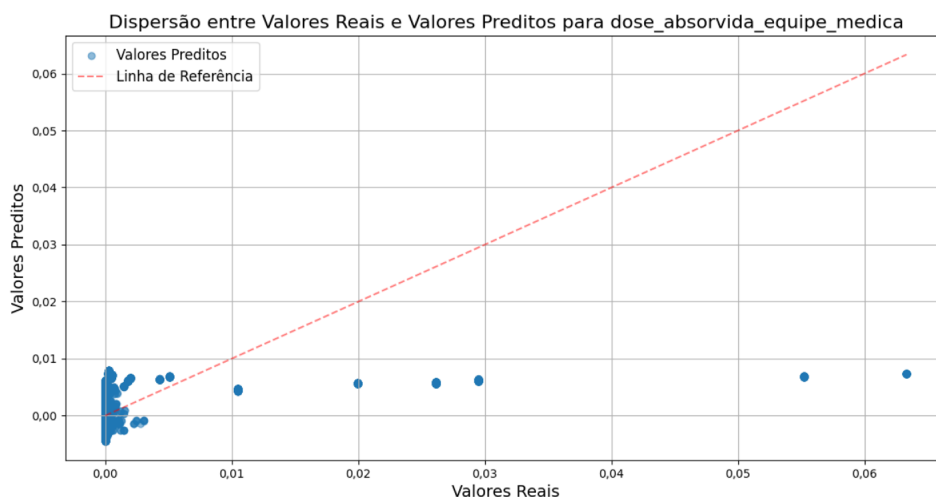


Figura 22 – Gráfico de dispersão para o modelo Elastic Net entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

embora ele ainda não seja suficiente para garantir previsões precisas de doses absorvidas, evidenciando a necessidade de explorar abordagens adicionais.

Os modelos de regressão linear, que tiveram seus resultados descritos até aqui, apesar de não terem apresentado um desempenho satisfatório nas previsões das doses absorvidas, servem como um ponto de partida para a avaliação comparativa com modelos mais avançados. Embora as métricas obtidas, como MSE e  $R^2$ , indiquem limitações significativas na capacidade preditiva, essas abordagens lineares fornecem uma referência inicial para contextualizar as melhorias esperadas em modelos mais complexos.

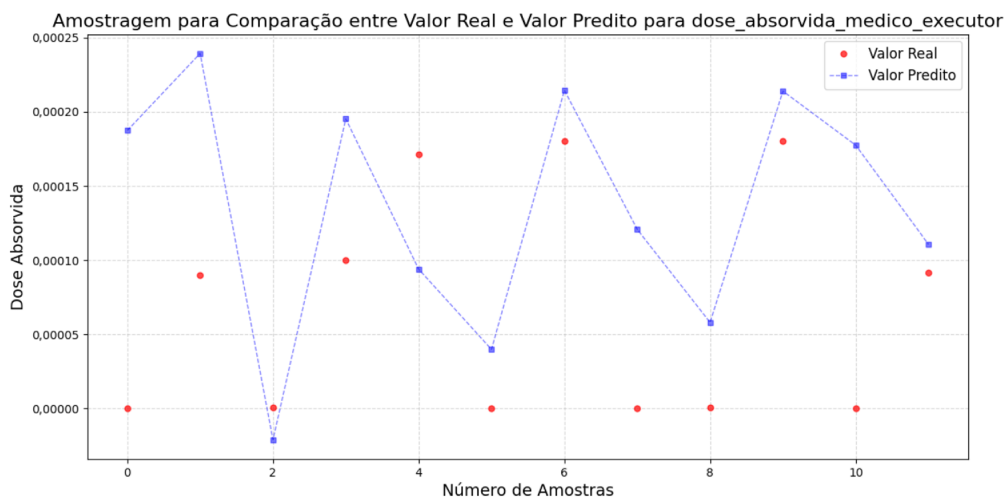


Figura 23 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de Elastic Net.

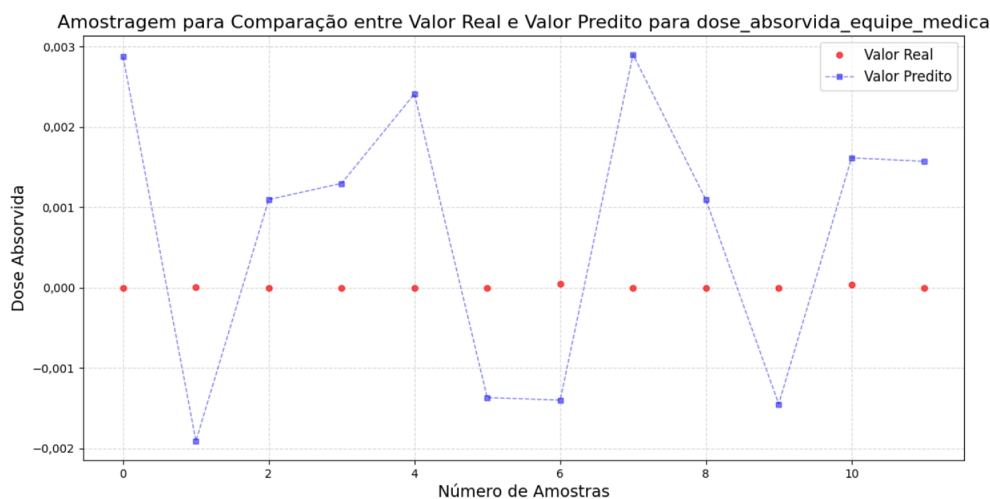


Figura 24 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de Elastic Net.

### 5.2.5 Árvore de Decisão - *Decision Tree*

O modelo de *Decision Tree* testado apresentou resultados notáveis que refletem uma boa capacidade preditiva, suas métricas estão apresentadas na Tabela 10 mostrando um valor de  $R^2$  extremamente alto e sugerindo que o modelo é capaz de capturar praticamente toda a variabilidade dos dados, e que existe uma relação forte entre as variáveis predictoras e as doses absorvidas. Este desempenho superou consideravelmente os resultados obtidos com os modelos lineares, que demonstraram limitações na capacidade de previsão.

Os gráficos de dispersão, presentes nas Figuras 25 e 26, gerados para visualizar as previsões do modelo, mostram que os pontos dos valores previstos estão próximos e em cima da linha de referência, o que indica um bom encaixe do modelo aos dados. Nos gráficos de comparação, apresentados nas Figuras 27 e 27, a maior parte dos dados



Tabela 9 – Valores de métricas resultantes do modelo de Elastic Net na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,004688     |
| MSE                  | 0,000103     |
| MRE                  | 76892,517978 |
| RMSE                 | 0,010179     |
| $R^2$                | 0,096458     |

Tabela 10 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Decision Tree*

| Métrica de Avaliação | Valor    |
|----------------------|----------|
| MAE                  | 0,501182 |
| MSE                  | 0,955889 |
| MRE                  | 0,05841  |
| RMSE                 | 0,977696 |
| $R^2$                | 0,999526 |

previstos se alinha bem com os valores reais, demonstrando a eficácia do modelo em prever as doses absorvidas.

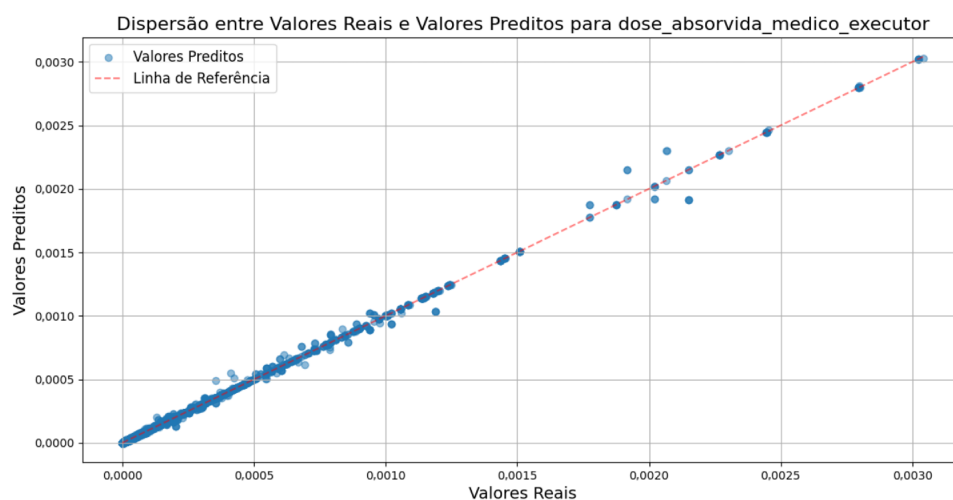


Figura 25 – Gráfico de dispersão para o modelo de Decision Tree entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

Neste modelo, o MRE apresentou um valor baixo, apontando que, em termos relativos, os erros são quase insignificantes comparados ao tamanho dos valores observados, o que pode indicar uma boa precisão para grande parte dos dados. O coeficiente de determinação apresenta um valor próximo de 1, o que implica que o modelo explica praticamente toda a variabilidade dos dados.

No entanto, esse desempenho pode levantar a questão da possibilidade de *overfitting*, onde o modelo pode ter aprendido ruídos ou particularidades dos dados de treino, comprometendo sua capacidade de generalização. Por isso, para ter uma avaliação mais

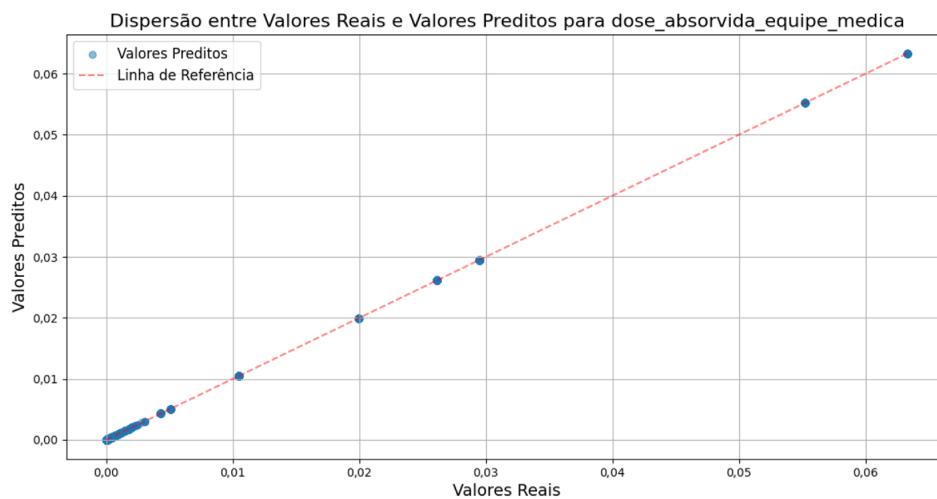


Figura 26 – Gráfico de dispersão para o modelo de *Decision Tree* entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

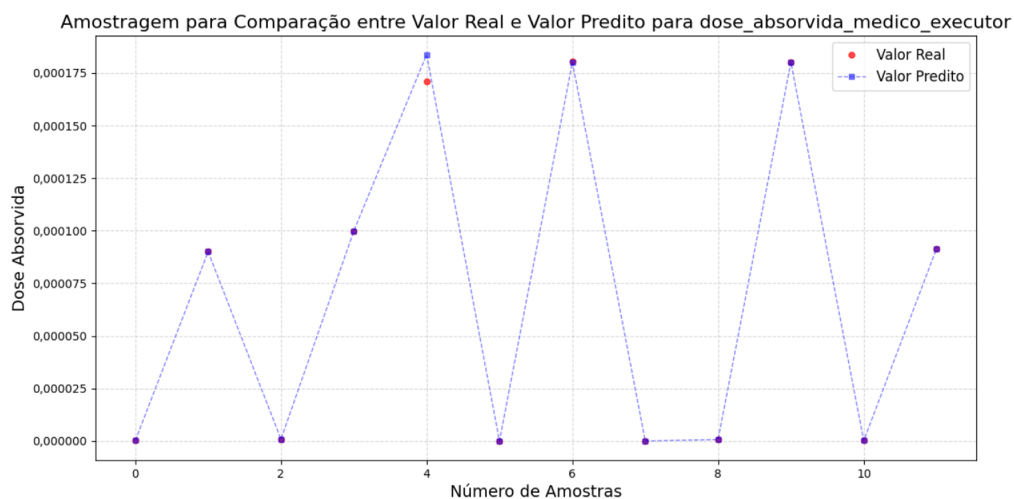


Figura 27 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de *Decision Tree*.

abrangente, foi a realizada a validação cruzada que tem seus resultados apresentados na Tabela 11.

A validação cruzada revelou resultados que indicam que o modelo não apenas se ajustou bem aos dados de treino, mas também manteve uma boa capacidade preditiva. Esse desempenho destaca a eficácia do modelo de Árvores de Decisão e reforça a necessidade de continuar explorando técnicas de modelagem mais complexas para garantir que os resultados se traduzam em previsões precisas em cenários do mundo real.

A diferença entre os valores das métricas de treino e teste com a validação cruzada pode indicar que o modelo aprendeu a capturar nuances dos dados durante o treinamento, resultando em previsões mais precisas nas iterações de validação.

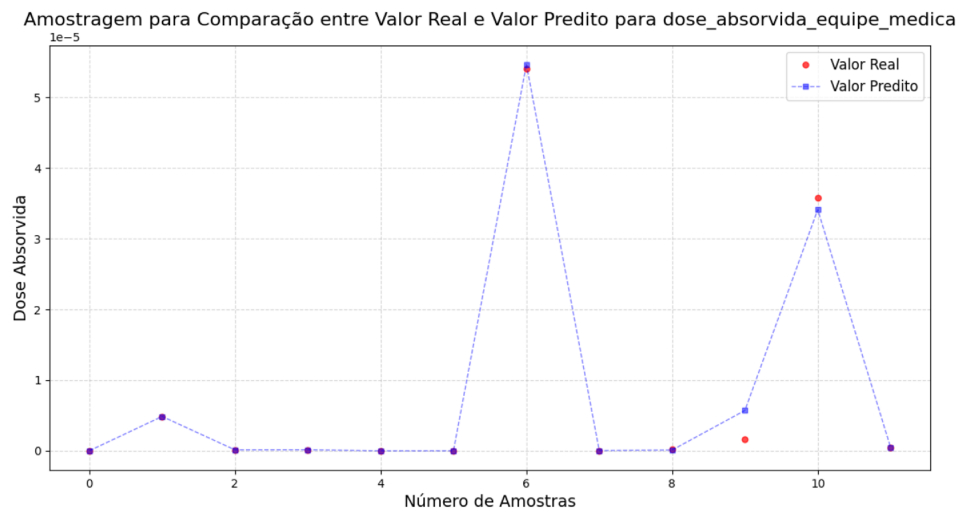


Figura 28 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de *Decision Tree*.

Tabela 11 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Decision Tree* na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 4,130883e-7  |
| MSE                  | 2,374334e-11 |
| MRE                  | 0,051518     |
| RMSE                 | 4,872714e-6  |
| $R^2$                | 0,999686     |

### 5.2.6 Floresta Aleatória - *Random Forest*

Para explorar modelos mais complexos, o algoritmo de *Random Forest* foi aplicado e se destacou por sua capacidade de captura de interações não lineares entre as variáveis. As métricas obtidas para o conjunto de teste estão dispostas na Tabela 12, e apesar da precisão do modelo, ainda há um espaço para melhorias na previsão, uma vez que o MRE reflete que existe uma variabilidade significativa nas previsões.

Tabela 12 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Random Forest*

| Métrica de Avaliação | Valor    |
|----------------------|----------|
| MAE                  | 0,500997 |
| MSE                  | 0,954679 |
| MRE                  | 0,377988 |
| RMSE                 | 0,977077 |
| $R^2$                | 0,999737 |

O MRE apresentado indica uma proporção relativa de erro moderada, sugerindo que o modelo lida bem com a escala dos dados, mas ainda pode apresentar dificuldade em prever valores específicos com alta precisão. O coeficiente de determinação extremamente

alto sugere que o modelo explica quase toda a variabilidade dos dados. O MSE e o RMSE apontam para a presença de erros significativos, embora estes sejam bem distribuídos no conjunto de dados.

Além das métricas numéricas, os gráficos gerados para o modelo de *Random Forest* revelaram um padrão semelhante ao observado com o modelo de *Decision Tree*, confirmando a precisão das previsões. No gráfico de dispersão, nas Figuras 29 e 30, os pontos dos valores previstos alinham-se de forma consistente sobre a linha de referência, indicando que as previsões estão em conformidade com os valores reais. Da mesma forma, no gráfico de comparação, nas Figuras 31 e 31, a maioria dos dados previstos se sobrepõe aos valores reais, refletindo um ajuste eficaz do modelo.

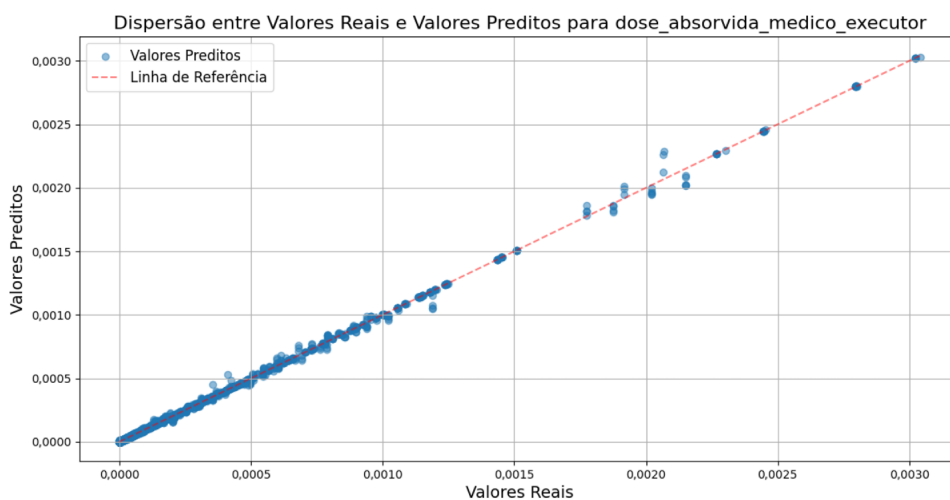


Figura 29 – Gráfico de dispersão para o modelo de *Random Forest* entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

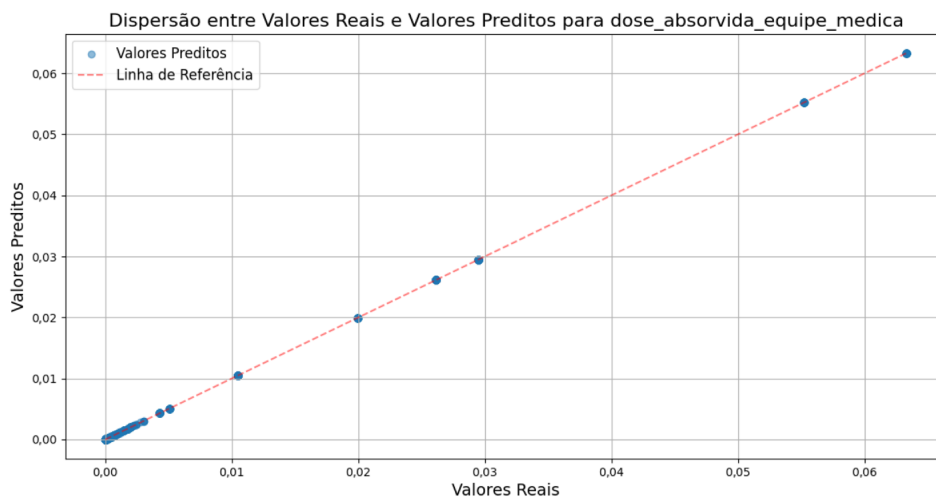


Figura 30 – Gráfico de dispersão para o modelo de *Random Forest* entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

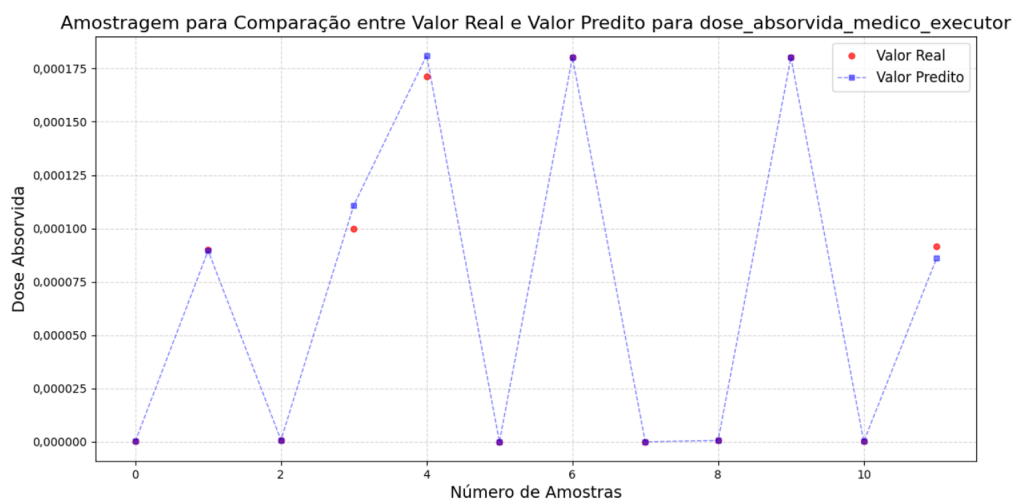


Figura 31 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de *Random Forest*.

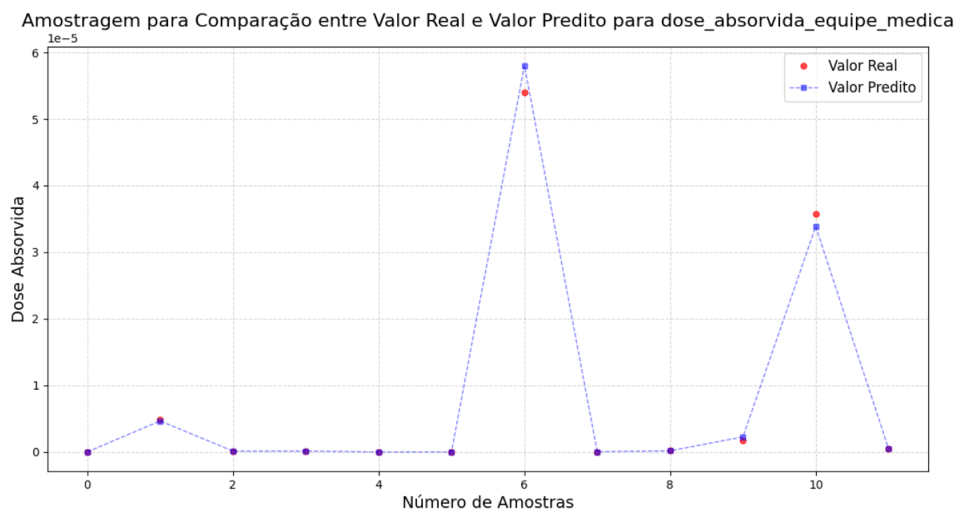


Figura 32 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de *Random Forest*.

Os resultados da validação cruzada para o modelo de Random Forest estão apresentados na Tabela 13. Comparando com as métricas do conjunto de teste, observa-se uma consistência nas previsões.

O modelo de *Random Forest* mostrou um desempenho relativamente bom em ambos os conjuntos, a diferença nos valores das métricas sugere que o modelo é capaz de capturar nuances e variações nos dados, apresentando um potencial de generalização.

### 5.2.7 Gradient Boosting

Dando continuidade à exploração de modelos mais complexos, foi desenvolvido o algoritmo de *Gradient Boosting*, que demonstrou um desempenho significativo nas previsões. As métricas obtidas para o conjunto de teste, presentes na Tabela 14, indicam que o

Tabela 13 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Random Forest* na validação cruzada.

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 9,229581e-7  |
| MSE                  | 1,776683e-10 |
| MRE                  | 0,147778     |
| RMSE                 | 1,332922e-5  |
| $R^2$                | 0,999770     |

modelo conseguiu explicar uma proporção considerável da variabilidade nos dados. Embora o modelo tenha se comportado de forma sólida, ainda há espaço para aprimoramento nas previsões, uma vez que o MRE demonstra que algumas previsões podem estar mais distantes dos valores reais.

Tabela 14 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Gradient Boosting*

| Métrica de Avaliação | Valor       |
|----------------------|-------------|
| MAE                  | 0,431222    |
| MSE                  | 0,592424    |
| MRE                  | 7219,089125 |
| RMSE                 | 0,769691    |
| $R^2$                | 0,80517     |

Nas métricas do modelo *Gradient Boosting*, o MAE demonstra que o modelo apresenta um desvio absoluto médio relativamente baixo, indicando boa precisão geral. O MSE e o RMSE refletem que os erros mais significativos são menores em magnitude do que nos modelos anteriores, sinalizando um melhor ajuste geral. O MRE elevado sugere problemas com previsões relativas e o coeficiente de determinação mostra que o modelo explica 80,52% da variabilidade dos dados, destacando um bom desempenho preditivo.

Os gráficos de dispersão, nas Figuras 33 e 34, apresentaram um padrão semelhante ao da regressão linear, embora os pontos tivessem uma distribuição levemente mais dispersa, sugerindo que o modelo não capturou com precisão todas as nuances dos dados. Já os gráficos de comparação, nas Figuras 35 e 36, que deveriam refletir uma correspondência próxima entre os valores previstos e reais, mostrou a presença de dados negativos, o que é inconsistente com a natureza das doses absorvidas.

Para testar a consistência do modelo de *Gradient Boosting*, foi realizada a validação cruzada, e os resultados confirmaram as observações feitas anteriormente, como apresentado na Tabela 15. O MSE e o RMSE indicaram uma variação de erro reduzida em relação ao conjunto de teste, sugerindo que o modelo manteve uma certa estabilidade nas previsões. No entanto, o MRE e o  $R^2$ , consistentes com os resultados de teste, reforçam que o modelo apresenta dificuldades em ajustar com precisão os valores reais.

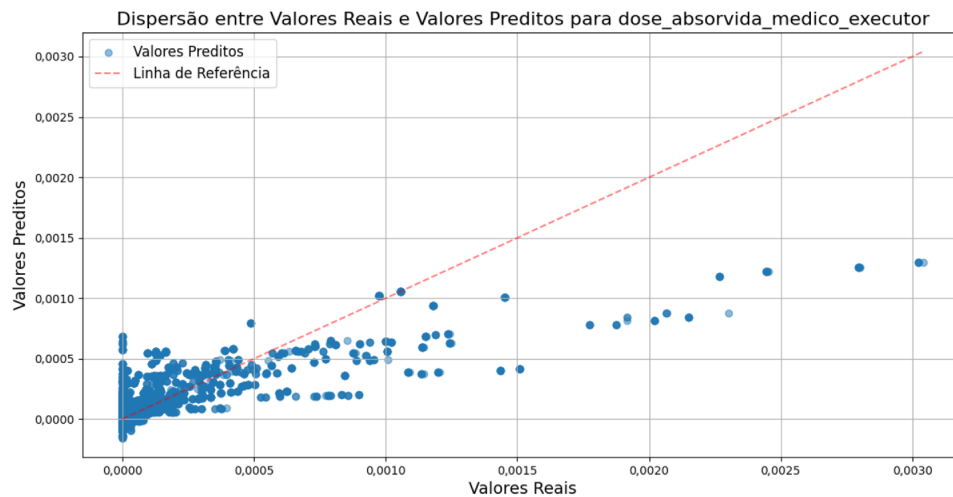


Figura 33 – Gráfico de dispersão para o modelo de *Gradient Boosting* entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

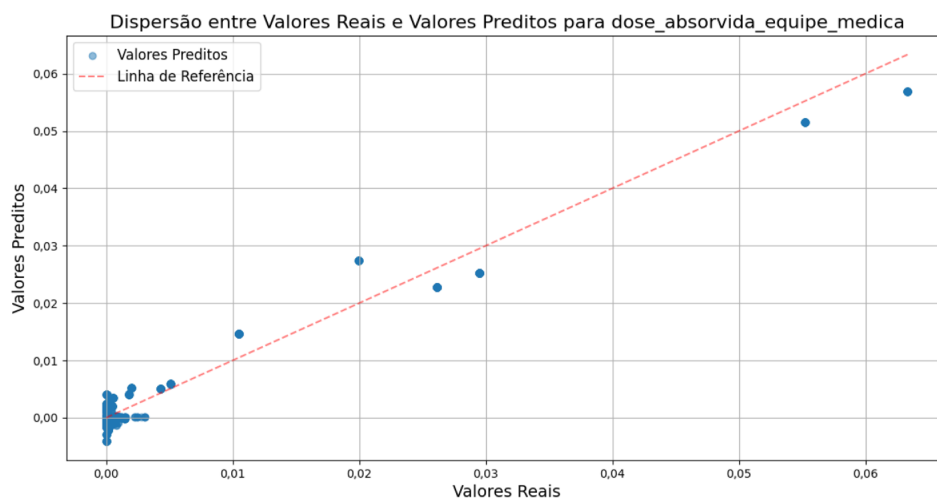


Figura 34 – Gráfico de dispersão para o modelo de *Gradient Boosting* entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

Entre os modelos testados até o momento, o *Gradient Boosting* não se destacou como o mais eficiente, apesar de seu potencial para capturar relações complexas nos dados. Ainda que o modelo seja um modelo mais sofisticado, ele não foi capaz de capturar adequadamente as nuances do conjunto de dados deste estudo.

#### 5.2.7.1 XGBoost

Ao testar o modelo *XGBoost* para aprofundar a análise, os resultados iniciais indicaram um desempenho significativamente superior em relação ao modelo anterior de *Gradient Boosting* simples. As métricas de erro apresentadas na Tabela 16, sugerem que o *XGBoost* conseguiu uma aproximação muito próxima dos valores reais, porém o MRE indica a presença de algumas previsões com erro relativo elevado.

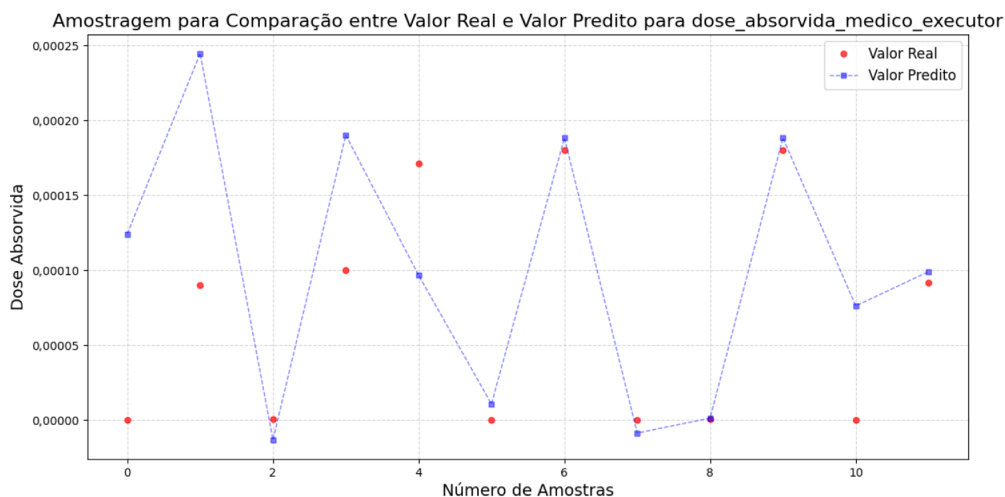


Figura 35 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de *Gradient Boosting*.

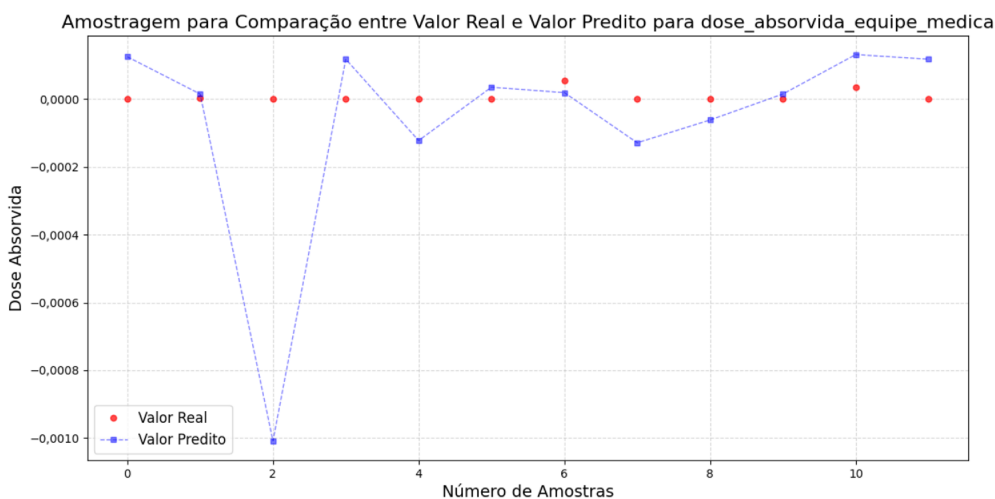


Figura 36 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de *Gradient Boosting*.

As métricas obtidas para o modelo XGBoost indicam um desempenho onde o MAE reflete um erro absoluto médio extremamente baixo, enquanto o MSE e o RMSE de reforçam essa precisão, com valores pequenos. O MRE, porém, apresenta um valor alto, indicando que, em termos relativos, o modelo pode apresentar algumas inconsistências, possivelmente influenciadas por *outliers* ou valores extremos nos dados. O coeficiente de determinação sugere que o modelo é capaz de explicar grande variabilidade dos dados.

Nos gráficos de dispersão, nas Figuras 37 e 38, observa-se que a maioria dos valores preditos estão relativamente próximos à linha de referência, o que confirma a precisão do modelo para grande parte das amostras. No entanto, os alguns pontos mais distantes da linha de referência indicam erros residuais que comprometem parcialmente a exatidão das previsões para determinados casos.

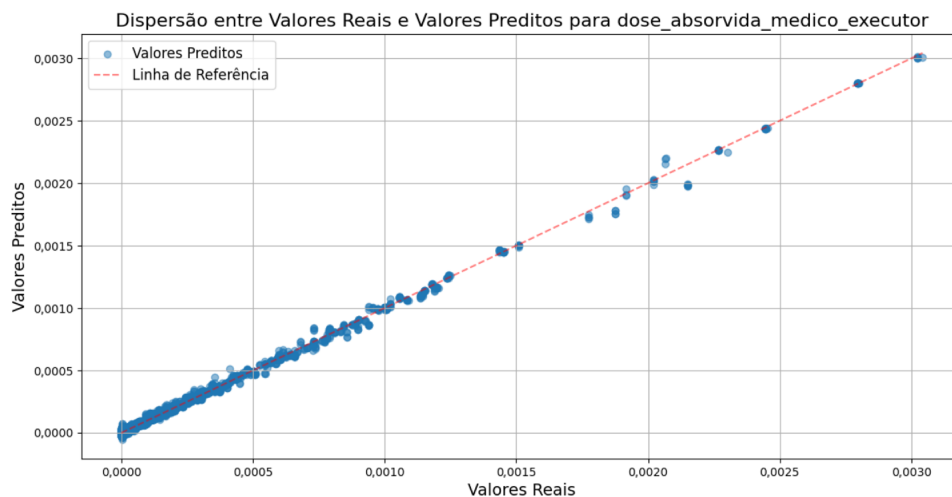


Tabela 15 – Valores de métricas resultantes do modelo de *Gradient Boosting* na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor       |
|----------------------|-------------|
| MAE                  | 0,001841    |
| MSE                  | 1,680525e-5 |
| MRE                  | 6918,284937 |
| RMSE                 | 0,004099    |
| $R^2$                | 0,800459    |

Tabela 16 – Valores de métricas resultantes do modelo de *XGBoost*

| Métrica de Avaliação | Valor       |
|----------------------|-------------|
| MAE                  | 2,106467e-5 |
| MSE                  | 5,702751e-9 |
| MRE                  | 169,188769  |
| RMSE                 | 7,551656e-5 |
| $R^2$                | 0,999257    |

Figura 37 – Gráfico de dispersão para o modelo de *XGBoost* entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

Nos gráficos de comparação, nas Figuras 39 e 40, os valores preditos mostram uma aproximação superior em relação a alguns modelos anteriores, mas a presença de valores negativos ainda coloca em questão a consistência do modelo em situações específicas.

Os resultados da validação cruzada, colocados na Tabela 17, para o modelo *XGBoost* confirmam a boa performance observada nos testes iniciais, com métricas de erro relativamente baixas. Entretanto, o valor do MRE ainda é relativamente alto em relação a outros modelos.

Os valores resultante do cálculo das métricas posicionam o *XGBoost* como uma alternativa promissora, especialmente ao comparar com alguns dos modelos testados

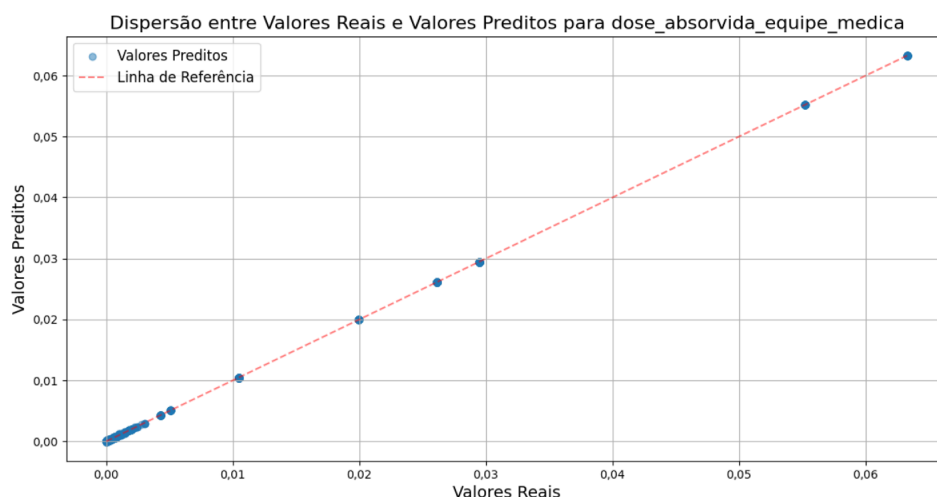


Figura 38 – Gráfico de dispersão para o modelo de *XGBoost* entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

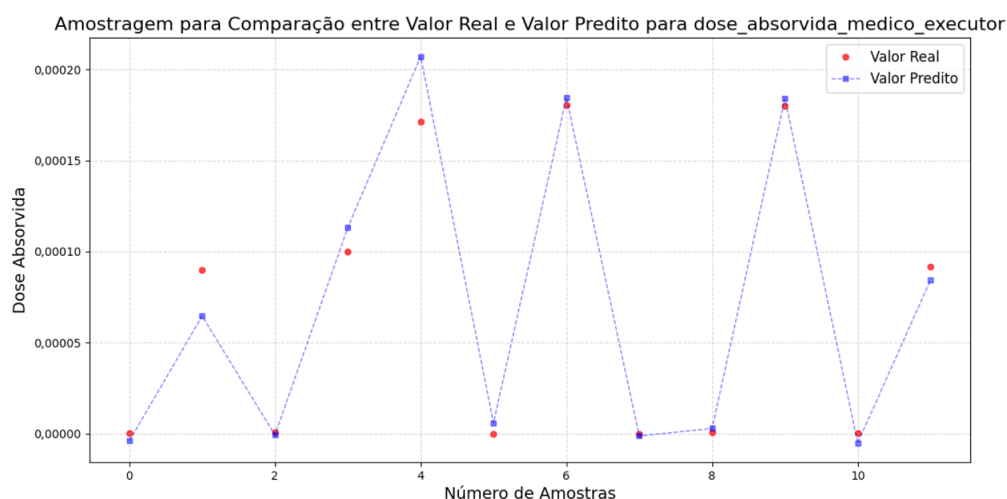


Figura 39 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de *XGBoost*.

anteriormente.

Entre os modelos de *Decision Tree*, *Random Forest*, *Gradient Boosting* e *XGBoost*, observou-se que a *Decision Tree* e o *Random Forest* mostraram os melhores desempenhos, com alta precisão e valores de  $R^2$  muito próximos de 1, indicando bom ajuste aos dados. O *Gradient Boosting*, embora também baseado em árvores, apresentou resultados inferiores, com erros mais altos e gráficos que evidenciaram limitações na previsão. O *XGBoost*, apesar de uma precisão mais elevada do que o *Gradient Boosting*, mostrou certa instabilidade confirmada pela sua métrica MRE.

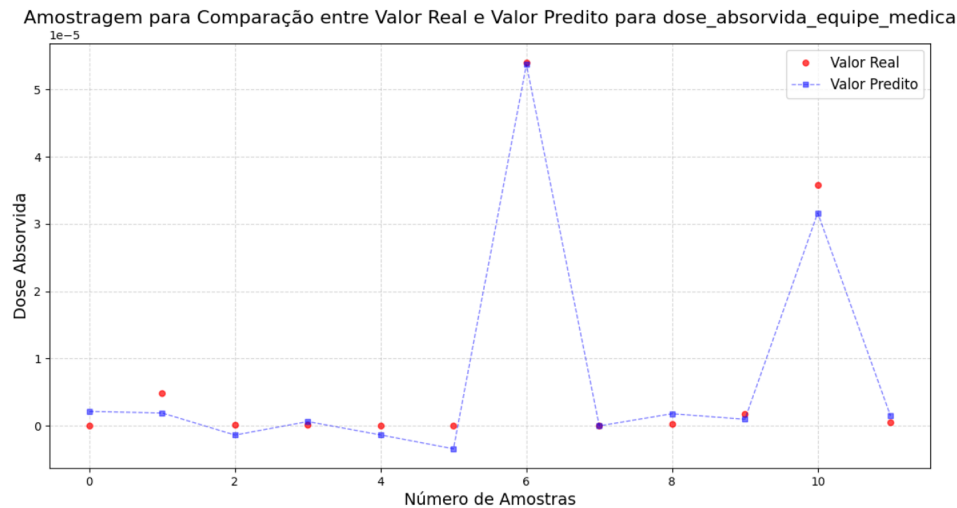


Figura 40 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de *XGBoost*.

Tabela 17 – Valores de métricas resultantes do modelo de *XGBoost* na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor       |
|----------------------|-------------|
| MAE                  | 1,834748e-5 |
| MSE                  | 4,535218e-9 |
| MRE                  | 152,077248  |
| RMSE                 | 6,734403e-5 |
| $R^2$                | 0,999390    |

### 5.2.8 Support Vector Regression - SVR

Para explorar abordagens diferentes na predição de valores com os dados desse estudo, o modelo SVR com os parâmetros ajustados pelo Grid Search, onde  $C = 100,0$  e  $\epsilon = 0,5$ , tem suas métricas mostradas na Tabela 18.

As métricas de desempenho indicam que o modelo pode ser capaz de minimizar o MAE, no entanto apresenta um ajuste geral significativamente inferior em comparação com outros modelos, refletido pelo baixo valor de  $R^2$ . Essa performance sugere que o SVR não capturou a complexidade dos dados de maneira eficaz, mostrando-se menos adequado para a tarefa do que as abordagens de modelos baseados em árvores de decisão testados anteriormente.

Nos gráficos gerados para o modelo SVR, o desempenho visual reforça a limitação observada nas métricas. Nos gráficos de dispersão, apresentados nas Figuras 41 e 42, muitos pontos se encontram distantes da linha de referência, indicando divergências significativas entre os valores reais e os preditos. Já no gráfico de comparação, presentes nas Figuras 43 e 44, observa-se que alguns valores estão bastante afastados dos valores reais, incluindo previsões negativas, o que compromete ainda mais a confiabilidade do modelo.

Tabela 18 – Valores de métricas resultantes do modelo de SVR

| Métrica de Avaliação | Valor         |
|----------------------|---------------|
| MAE                  | 0,890825      |
| MSE                  | 0,113272      |
| MRE                  | 110842,800415 |
| RMSE                 | 0,336559      |
| $R^2$                | 0,091852      |

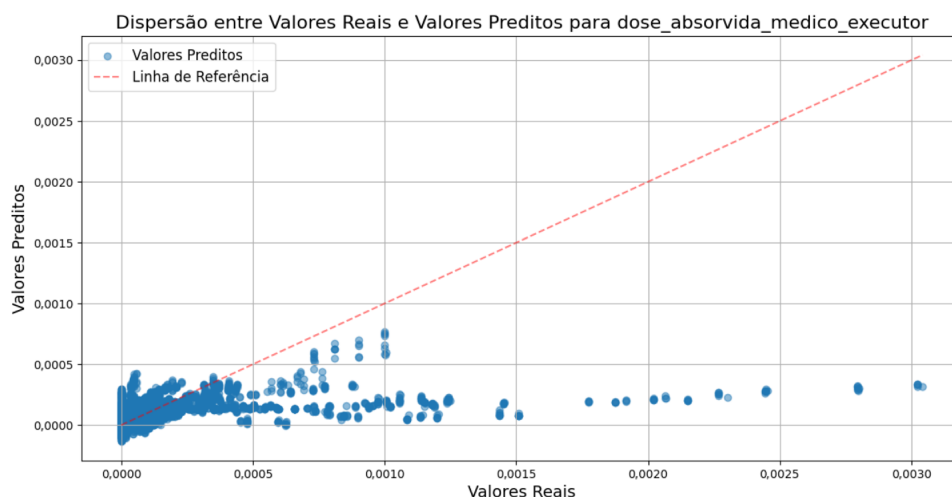


Figura 41 – Gráfico de dispersão para o modelo de SVR entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

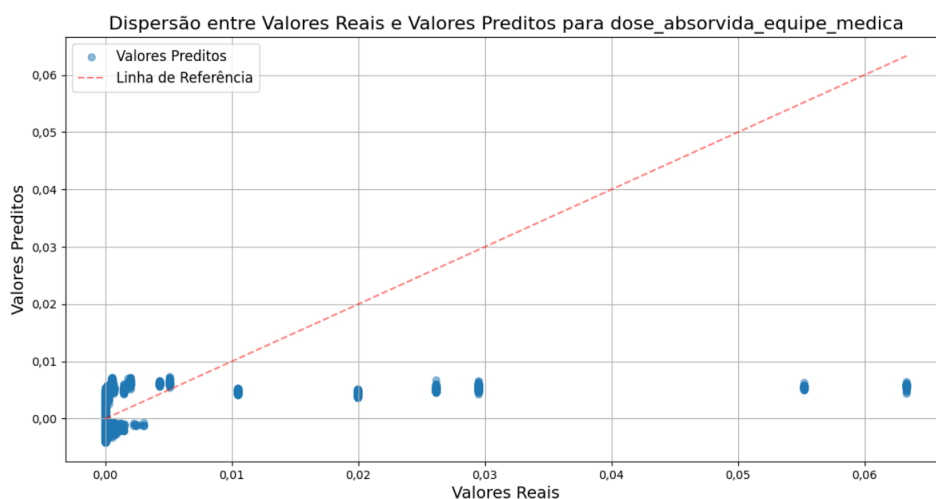


Figura 42 – Gráfico de dispersão para o modelo de SVR entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

Os valores das métricas aplicadas aos resultados da validação cruzada apresentados na Tabela 19 mostraram métricas consistentes com os resultados obtidos no conjunto de teste, confirmando que o modelo tem um desempenho estável entre diferentes partições dos dados. Apesar disso, o modelo ainda apresenta limitações, sem conseguir capturar

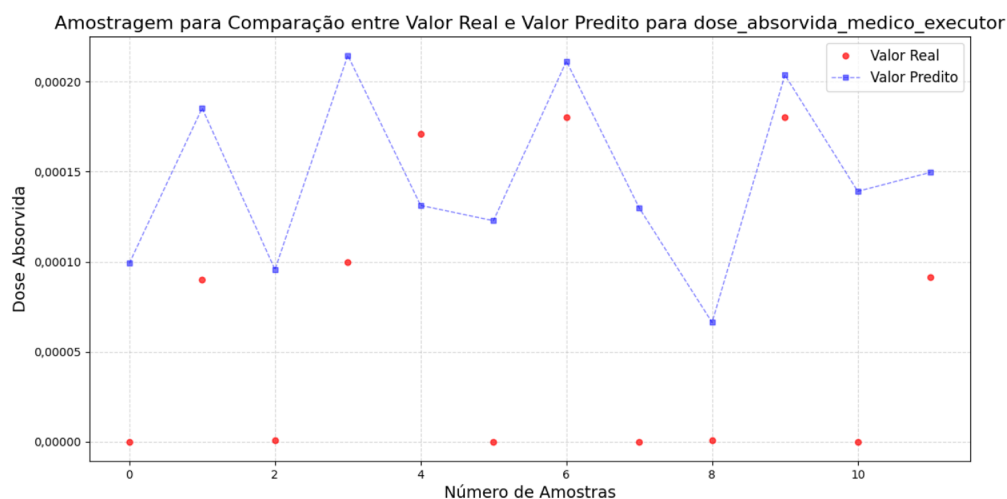


Figura 43 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de SVR.

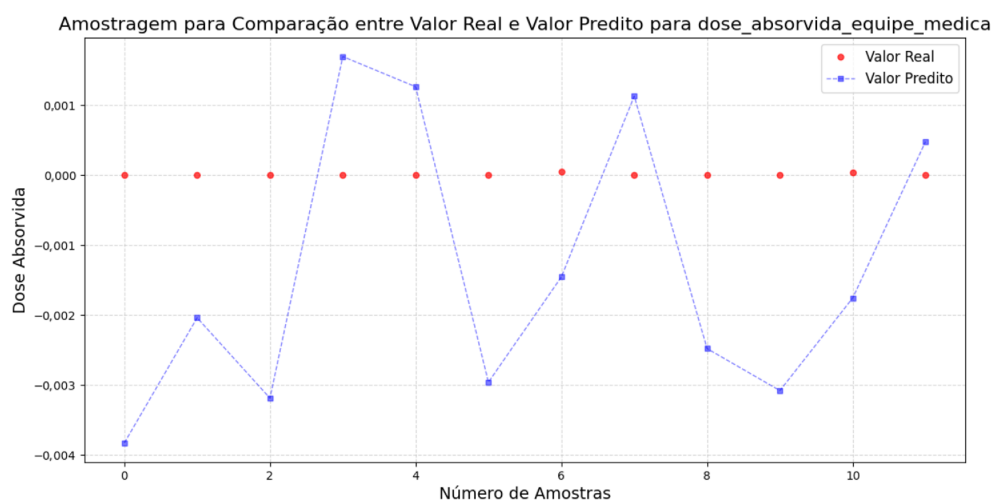


Figura 44 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de SVR.

bem as variabilidades dos dados e pode não ser o mais adequado para capturar as relações nos dados desse estudo.

Tabela 19 – Valores de métricas resultantes do modelo de SVR na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor         |
|----------------------|---------------|
| MAE                  | 0,004740      |
| MSE                  | 0,000109      |
| MRE                  | 110842,800414 |
| RMSE                 | 0,336559      |
| $R^2$                | 0,091851      |

### 5.2.9 Multilayer Perceptron - MLP

Para explorar abordagens de redes neurais, o MLP foi desenvolvido com o objetivo de avaliar o desempenho em comparação com os modelos anteriores, uma vez que este modelo é conhecido por capturar relações não lineares entre as variáveis. Após o treinamento do modelo com os dados, as métricas de avaliação de desempenho no conjunto de teste são apresentadas na Tabela 20.

Tabela 20 – Valores de métricas resultantes do modelo de MLP

| Métrica de Avaliação | Valor       |
|----------------------|-------------|
| MAE                  | 0,499086    |
| MSE                  | 0,952109    |
| MRE                  | 4651,447716 |
| RMSE                 | 0,975761    |
| $R^2$                | 0,995031    |

Os resultados indicam que o modelo MLP teve um bom desempenho geral, com um  $R^2$  de 0,995, mostrando capacidade de explicar a variabilidade dos dados. O RMSE relativamente baixo sugere que o modelo teve sucesso em prever com precisão grande parte dos dados. Contudo, o MRE mais elevado aponta uma dificuldade do modelo em capturar certas variações locais, o que pode ser uma indicação de valores extremos no conjunto ou limitações do modelo em prever alguns valores específicos com precisão.

Os gráficos de dispersão e de comparação de valores preditos com valores reais foram gerados para visualizar a performance do modelo MLP. Nos gráficos de dispersão, nas Figuras 45 e 46, observa-se que a maioria dos pontos está próxima da linha de referência, sugerindo que as previsões estão, em grande parte, alinhadas com os valores reais. No entanto, como nem todos os pontos estão em cima da linha de referência, isso reforça a presença de certos erros de previsão em casos específicos.

Nos gráficos de comparação, presentes nas Figuras 47 e 48, a maior parte dos valores previstos coincide com os valores reais, porém existem pontos mais distantes da linha de referência e alguns valores negativos, o que revela que o modelo, apesar de robusto, apresenta limitações para certos casos específicos.

Para avaliar a consistência do modelo MLP, a validação cruzada foi realizada e os resultados, presentes na Tabela 21, confirmaram um desempenho relativamente sólido.

O modelo se manteve consistente em termos de MSE e MAE, com baixos valores de RMSE e uma explicação de variância  $R^2$  em torno de 0,89. No entanto, o MRE elevado continua evidenciando a presença de discrepâncias em alguns casos específicos, onde o modelo parece não ter capturado de forma adequada as variações locais dos dados.

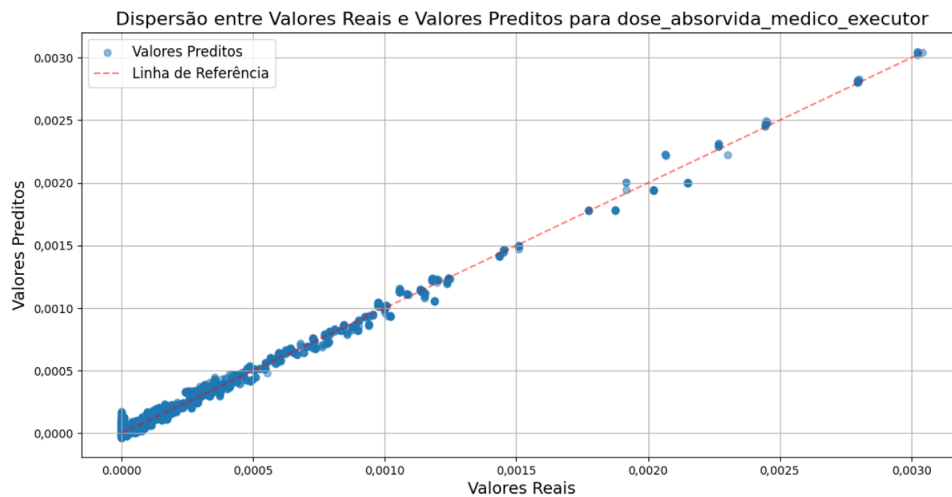


Figura 45 – Gráfico de dispersão para o modelo de MLP entre valores reais e preditos para o médico executor contendo linha de referência.

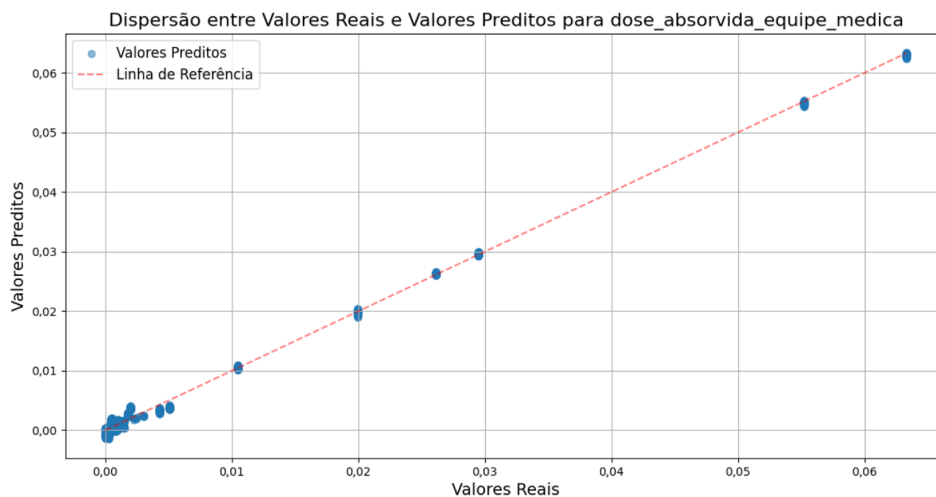


Figura 46 – Gráfico de dispersão para o modelo de MLP entre valores reais e preditos para a equipe médica contendo linha de referência.

### 5.2.10 AutoML

Para explorar uma abordagem automatizada na seleção de modelos e otimização de hiperparâmetros, foi utilizado o TPOT, uma ferramenta de AutoML. O objetivo foi identificar o modelo de AM que melhor se adapta aos dados, sem intervenção manual direta, já que o TPOT realiza uma série de testes automatizados, combinando modelos e hiperparâmetros para identificar a melhor configuração para os dados específicos do estudo.

O processo indicou o *DecisionTreeRegressor* como o modelo mais adequado, especificando alguns parâmetros. O parâmetro *max\_depth* = 9, que limita a profundidade da árvore, ajudando a evitar *overfitting*. O *min\_samples\_leaf* = 5, define o número mínimo de amostras para que uma folha seja criada, prevenindo a criação de folhas com poucos

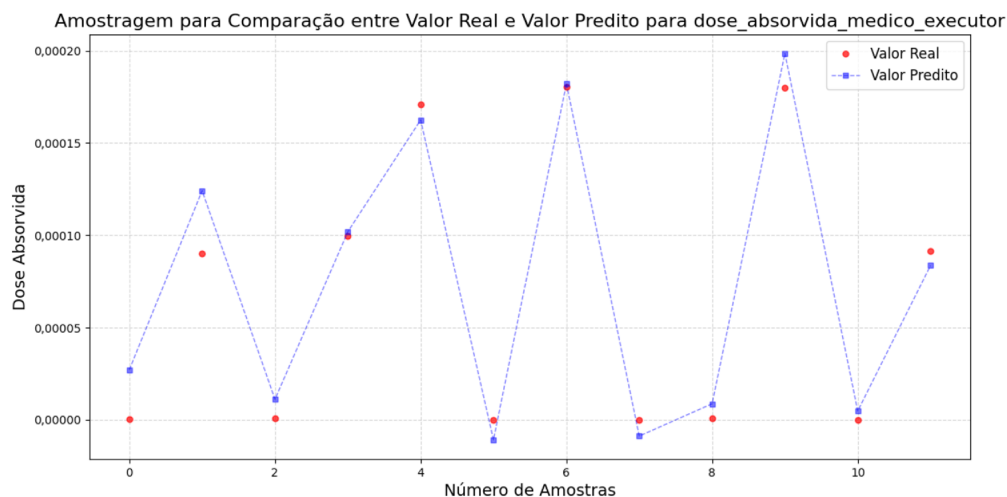


Figura 47 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para o médico executor no modelo de MLP.

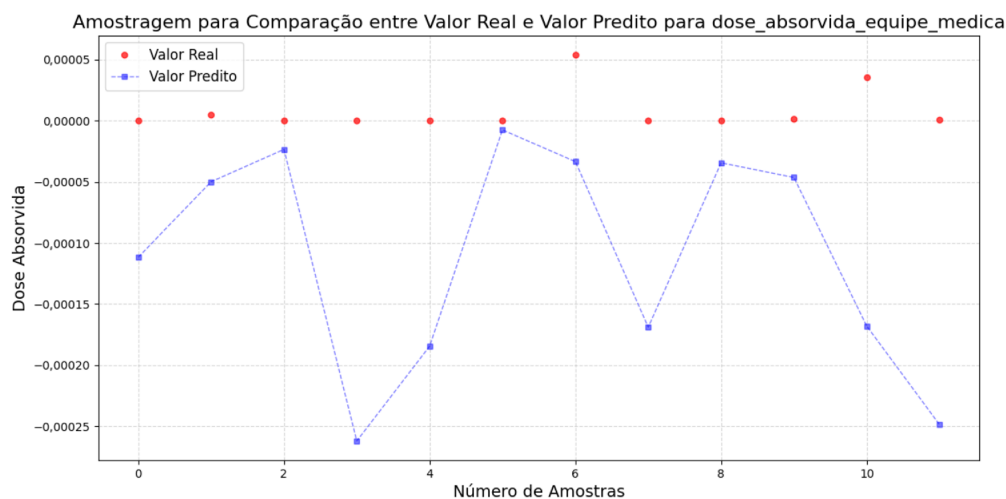


Figura 48 – Gráfico de comparação entre valores preditos e reais por amostras aleatórias de 1 em 750 para a equipe médica no modelo de MLP.

dados e, assim, minimizando o ruído. E o  $min\_samples\_split=5$ , que especifica o número mínimo de amostras necessário para dividir um nó.

A recomendação através do AutoML usando TPOT para o uso do *DecisionTreeRegressor* ressalta o bom desempenho que modelos de *Decision Tree* podem ter nesse conjunto de dados específico. A simplicidade da *Decision Tree*, combinada com uma profundidade e divisões equilibradas, indica uma capacidade de ajuste sem superajuste aos dados de treinamento.

Para facilitar a compreensão e análise dos resultados obtidos, foram criados gráficos comparativos das métricas de desempenho entre os modelos testados na validação treino e teste. A comparação visual dessas métricas permite observar a eficácia de cada modelo em relação aos demais.



Tabela 21 – Valores de métricas resultantes do modelo de MLP na validação cruzada

| Métrica de Avaliação | Valor        |
|----------------------|--------------|
| MAE                  | 0,001386     |
| MSE                  | 9,401198e-6  |
| MRE                  | 17595,876613 |
| RMSE                 | 0,003066     |
| $R^2$                | 0,890825     |

No primeiro gráfico na Figura 49, os valores das métricas MAE, MSE e RMSE para cada modelo são apresentados, mostrando que modelos como o XGBoost, *Decision Tree* e Random Forest possuem valores muito baixos para MAE e MSE, o que indica uma boa precisão dos mesmos. Modelos como SVR apresentam valores de MSE e RMSE mais altos, indicando um desempenho inferior em comparação com os outros modelos. A métrica RMSE, sendo uma medida da magnitude do erro, reflete que os modelos XGBoost, *Decision Tree* e Random Forest são mais adequados para minimizar os erros de predição.

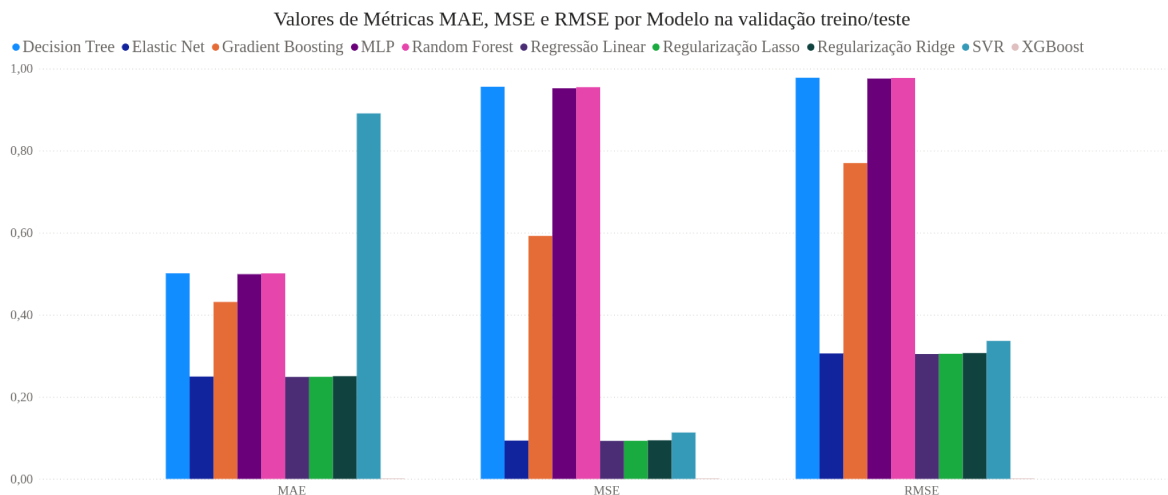


Figura 49 – Gráfico de comparação de métricas MAE, MSE e MRE por modelo.

O coeficiente de determinação que fornece uma indicação do quanto da variabilidade dos dados é explicada pelo modelo, está apresentado na Figura 50. Os modelos como *XGBoost*, *Decision Tree* e *Random Forest* têm valores próximo de 1.00, indicando uma forte capacidade de explicação dos dados. Em contraste, o modelo SVR apresenta um  $R^2$  bem mais baixo, refletindo uma menor capacidade de ajuste aos dados.

Na Figura 51 está apresentada a métrica MRE que mostra a magnitude do erro relativo, importante para entender a precisão dos modelos em relação aos valores reais. Novamente, *XGBoost*, *Decision Tree* e *Random Forest* se destacam com valores de MRE muito baixos, indicando maior precisão. Modelos como Regularização Ridge e SVR apresentam valores significativamente altos, o que aponta para uma maior discrepância entre as previsões e os valores reais.

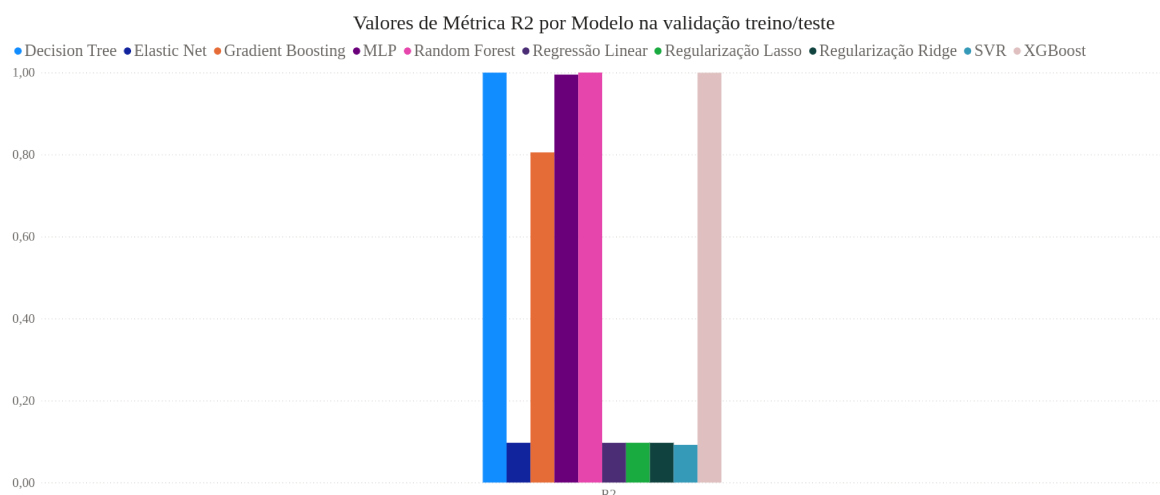


Figura 50 – Gráfico de comparação de métrica  $R^2$  por modelo.

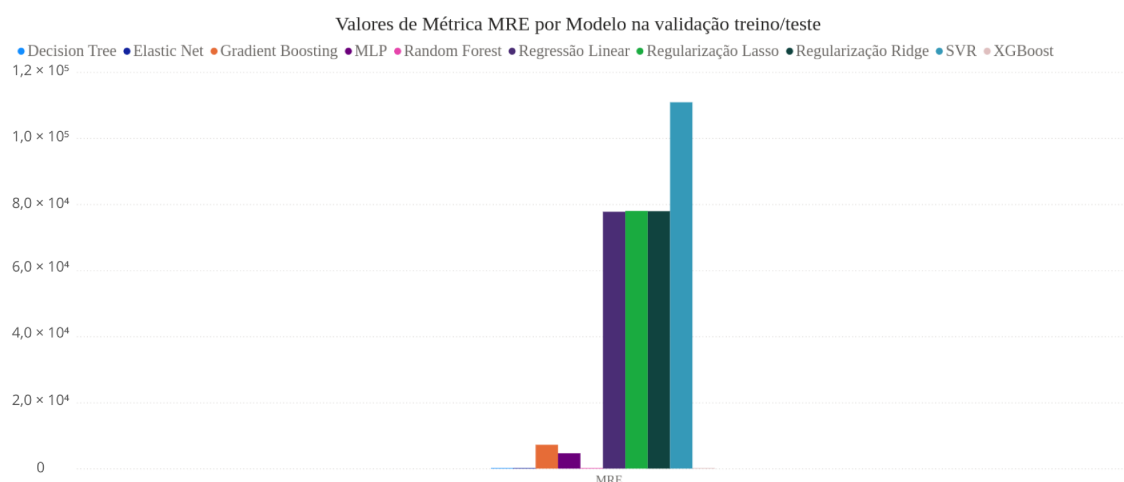


Figura 51 – Gráfico de comparação de métrica MRE por modelo.

A análise das métricas de desempenho dos modelos de AM aplicados neste estudo possibilitou a identificação dos algoritmos mais adequados para a previsão de doses absorvidas. Observou-se que, além dos modelos *XGBoost* e *Random Forest*, o *Decision Tree* também apresentou desempenho competitivo. Embora o *Decision Tree* não tenha superado o *Random Forest* e o *XGBoost* em precisão, ele demonstrou bons resultados, com valores de erro relativamente baixos (MAE, MSE e RMSE) e um  $R^2$  que reflete um desempenho satisfatório.

Os modelos baseados em árvores de decisão, como o *Decision Tree*, têm como vantagem adicional a simplicidade de sua estrutura e a menor demanda computacional. Diferentemente de modelos como o MLP, que requerem maior capacidade computacional e tempo de processamento devido à complexidade de sua arquitetura de rede neural, as árvores de decisão são mais diretas e interpretáveis, proporcionando uma boa relação entre custo e benefício. Isso torna o *Decision Tree* uma opção atraente para aplicações onde a rapidez e eficiência de processamento são essenciais, especialmente em ambientes com

recursos computacionais limitados ou onde o tempo de execução é um fator crítico.

Assim, estes resultados evidenciam que os modelos de árvores de decisão, como o *Decision Tree*, podem ser viáveis para a predição de doses absorvidas, oferecendo uma alternativa prática e eficiente em termos de custo computacional, inclusive sendo o modelo recomendado pelo modelo de AutoML. Ao mesmo tempo, modelos mais robustos como *Random Forest* e *XGBoost* se destacam quando a precisão é a prioridade, embora exijam maior poder de processamento. Esse equilíbrio entre simplicidade e eficácia, conforme demonstrado pelos resultados obtidos, pode guiar futuras implementações e escolhas de modelo em estudos semelhantes.

Neste trabalho, optou-se por não realizar a análise de propagação de erros, uma vez que foi priorizada a coleta de dados, a modelagem, e a análise dos resultados comparativos. Essa escolha está fundamentada no fato de que o principal foco da pesquisa é explorar a aplicação de métodos de AM para previsões de doses absorvidas e validar a abordagem com base nas comparações com simulações do MCNP.

Entretanto, trabalhos futuros podem se beneficiar de uma análise mais detalhada da propagação de erros, complementando os resultados e refinando as conclusões apresentadas ao abranger incertezas em cada etapa do processo.

## 6 Conclusões

Neste trabalho, foram explorados diversos modelos de AM para a previsão de doses de radiação absorvidas, utilizando resultados de simulações MCNP como referência. O objetivo principal foi avaliar a eficácia de cada modelo em termos de precisão, robustez e aplicabilidade nas condições do mundo real.

As simulações foram construídas com base em cenários representativos de salas de hemodinâmica, um ambiente crítico onde a exposição à radiação é uma preocupação para os IOE. Esses cenários foram projetados para refletir condições reais de operação, permitindo que os resultados obtidos não apenas validassem os modelos de AM, mas também oferecessem observações sobre a prática clínica. A escolha de salas de hemodinâmica como contexto para as simulações ressalta a aplicabilidade e a importância deste estudo para a segurança dos profissionais de saúde.

Os resultados obtidos mostraram que os modelos analisados apresentaram desempenhos variados, fornecendo análises sobre suas capacidades preditivas. Entre os modelos testados, os modelos de *Decision Tree* destacaram-se por apresentar o menor MSE e MAE, indicando sua superioridade em relação aos demais e alto valor para  $R^2$ , o que indica que os modelos também conseguem prever com muita precisão os dados e baixo MRE, mostrando que conseguem explicar a variabilidade dos dados de forma satisfatória. Essa performance sugere que o modelo é adequado para a tarefa em questão e pode ser utilizado como uma ferramenta confiável para a previsão de doses de radiação em aplicações práticas.

Os modelos de *Decision Tree*, apesar de sua simplicidade, demonstraram eficiência em suas previsões, além de não requerer tantos recursos computacionais como outros comparados aqui a exemplo do modelo MLP. Essa capacidade de interpretar os resultados de forma acessível é um grande benefício, especialmente em contextos onde a transparência dos modelos é essencial para a aceitação e implementação prática, também em situações de dosimetria em tempo real.

A comparação dos resultados dos modelos com os dados simulados do MCNP validou a eficácia do AM na análise de doses de radiação. A confirmação de que as previsões se alinham com as simulações de MCNP abre novas perspectivas para a utilização de modelos preditivos em ambientes clínicos e de pesquisa, onde decisões informadas sobre exposição à radiação são importantes.

Este estudo não apenas contribui para a compreensão da relação entre os modelos de AM e a previsão de doses absorvidas, mas também estabelece um caminho para futuras investigações nesta área. A direção para pesquisas futuras explorem a integração de dados adicionais e aplicação prática, a inclusão de variáveis adicionais e a aplicação de modelos

mais complexos podem levar a melhorias significativas na capacidade preditiva, ampliando o impacto das aplicações do AM no campo da radiologia e da proteção radiológica.

Desta forma, os resultados apresentados neste estudo demonstram o potencial significativo dos modelos de AM, incluindo as árvores de decisão, para abordar questões complexas de forma relativamente acessível na previsão de doses de radiação em tempo real. Este ponto destaca a importância de continuar explorando essas ferramentas em estudos subsequentes.

# Referências

- 1 TSAPAKI, V. et al. The international atomic energy agency action plan on radiation protection of patients and staff in interventional procedures: Achieving change in practice. *Physica Medica*, Elsevier, v. 52, p. 56–64, 2018. <<https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2018.06.634>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 35.
- 2 ROGUIN, A.; GOLDSTEIN, J.; BAR, O. Brain tumours among interventional cardiologists: a cause for alarm. *Report of four new cases from two cities and a review of the literature*. *EuroIntervention*, v. 7, n. 9, p. 1081–6, 2012. <<https://doi.org/10.4244/EIJV7I9A172>>. Citado na página 18.
- 3 MILLER, D. L. et al. Occupational radiation protection in interventional radiology: a joint guideline of the cardiovascular and interventional radiology society of europe and the society of interventional radiology. *Cardiovascular and interventional radiology*, Springer, v. 33, p. 230–239, 2010. <<https://doi.org/10.1016/j.jvir.2010.01.007>>. Citado na página 18.
- 4 FURHANG, E. E.; CHUI, C.-S.; SGOUROS, G. A monte carlo approach to patient-specific dosimetry. *Medical physics*, Wiley Online Library, v. 23, n. 9, p. 1523–1529, 1996. <<https://doi.org/10.1118/1.597882>>. Citado na página 18.
- 5 KRAMER, R. et al. Fash and mash: female and male adult human phantoms based on polygon mesh surfaces: Ii. dosimetric calculations. *Physics in medicine & biology*, IOP Publishing, v. 55, n. 1, p. 163, 2009. <<https://doi.org/10.1088/0031-9155/55/1/010>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 68.
- 6 NGUYEN, D. et al. A feasibility study for predicting optimal radiation therapy dose distributions of prostate cancer patients from patient anatomy using deep learning. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 9, n. 1, p. 1076, 2019. <<https://doi.org/10.1038/s41598-018-37741-x>>. Citado na página 18.
- 7 SHEN, D.; WU, G.; SUK, H.-I. Deep learning in medical image analysis. *Annual review of biomedical engineering*, Annual Reviews, v. 19, n. 1, p. 221–248, 2017. <<https://doi.org/10.1146/annurev-bioeng-071516-044442>>. Citado na página 18.
- 8 LITJENS, G. et al. A survey on deep learning in medical image analysis. *Medical image analysis*, Elsevier, v. 42, p. 60–88, 2017. <<https://doi.org/10.1016/j.media.2017.07.005>>. Citado na página 18.
- 9 MEYER, P. et al. Survey on deep learning for radiotherapy. *Computers in biology and medicine*, Elsevier, v. 98, p. 126–146, 2018. <<https://doi.org/10.1016/j.combiomed.2018.05.018>>. Citado na página 18.
- 10 MARIA, A.; MARIA, L. et al. Monte carlo simulation in radionuclide therapy dosimetry. *Biomedical Journal of Scientific & Technical Research*, Biomedical Research Network+, LLC, v. 15, n. 1, p. 11102–11107, 2019. <<https://doi.org/10.26717/BJSTR.2019.15.002647>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 39.

- 11 ROGERS, D. Fundamentals of dosimetry based on absorbed-dose standards. *Teletherapy Physics, Present and Future*, AAPM Washington, DC, p. 319–356, 1996. Citado na página 21.
- 12 BOS, A. J. Fundamentals of radiation dosimetry. In: AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS. *AIP Conference Proceedings*. [S.l.], 2011. v. 1345, n. 1, p. 5–23. <<https://doi.org/10.1063/1.3576156>>. Citado na página 21.
- 13 TOBIAS, I. P. et al. Análise de propriedades dosimétricas de materiais quanto à dependência energética usando simulação de monte carlo. Universidade Federal de Uberlândia, 2021. <<https://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.331>>. Citado na página 21.
- 14 KRYA, S. F. et al. Aapm tg 191: Clinical use of luminescent dosimeters: Tlds and oslds. *Medical Physics*, v. 47, p. 2, 2020. <<https://doi.org/10.1002/mp.13839>>. Citado na página 21.
- 15 SERVOMAA, A.; KAINULAINEN, E. Calculation of patient dose and somatic dose index due to roentgen examinations. *Medical physics*, Wiley Online Library, v. 12, n. 1, p. 1–4, 1985. <<https://doi.org/10.1118/1.595731>>. Citado na página 21.
- 16 AVANZO, M. et al. Artificial intelligence and the medical physicist: welcome to the machine. *Applied Sciences*, MDPI, v. 11, n. 4, p. 1691, 2021. <<https://doi.org/10.3390/app11041691>>. Citado na página 22.
- 17 CUI, S. et al. Introduction to machine and deep learning for medical physicists. *Medical physics*, Wiley Online Library, v. 47, n. 5, p. e127–e147, 2020. <<https://doi.org/10.1002/mp.14140>>. Citado na página 22.
- 18 SHU, Y. et al. Clinical applications of radiomics in non-small cell lung cancer patients with immune checkpoint inhibitor-related pneumonitis. *Frontiers in Immunology*, Frontiers Media SA, v. 14, p. 1251645, 2023. <<https://doi.org/10.3389/fimmu.2023.1251645>>. Citado na página 22.
- 19 SILVA, V. B. et al. Signal-carrying speckle in optical coherence tomography: a methodological review on biomedical applications. *Journal of Biomedical Optics*, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, v. 27, n. 3, p. 030901–030901, 2022. <<https://doi.org/10.1117/1.JBO.27.3.030901>>. Citado na página 22.
- 20 AZEVEDO, L. d. S. C. d. Detecção de tumor cerebral a partir de análise de imagens médicas usando inteligência artificial. Universidade Federal de Uberlândia, 2023. Citado na página 22.
- 21 BAKX, N. et al. Development and evaluation of radiotherapy deep learning dose prediction models for breast cancer. *Physics and imaging in radiation oncology*, Elsevier, v. 17, p. 65–70, 2021. <<https://doi.org/10.1016/j.phro.2021.01.006>>. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.
- 22 WALL, P. D.; FONTENOT, J. D. Application and comparison of machine learning models for predicting quality assurance outcomes in radiation therapy treatment planning. *Informatics in Medicine Unlocked*, Elsevier, v. 18, p. 100292, 2020. <<https://doi.org/10.1016/j.imu.2020.100292>>. Citado na página 23.

- 23 LU, Z. J. The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. Oxford University Press, 2010. <[https://doi.org/10.1111/j.1467-985X.2010.00646\\_6.x](https://doi.org/10.1111/j.1467-985X.2010.00646_6.x)>. Citado na página 23.
- 24 HYNDMAN, R. J.; KOEHLER, A. B. Another look at measures of forecast accuracy. *International journal of forecasting*, Elsevier, v. 22, n. 4, p. 679–688, 2006. <<https://doi.org/10.1016/j.ijforecast.2006.03.001>>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 54 e 55.
- 25 DESAI, S.; TAYARANI, M.; GAO, H. O. Developing machine learning models for hyperlocal traffic related particulate matter concentration mapping. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, Elsevier, v. 113, p. 103505, 2022. <<https://doi.org/10.1016/j.trd.2022.103505>>. Citado na página 23.
- 26 ALGHAMDI, A. A. Machine learning for predicting neutron effective dose. *Applied Sciences*, MDPI, v. 14, n. 13, p. 5740, 2024. <<https://doi.org/10.3390/app14135740>>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- 27 WRIXON, A. D. New icrp recommendations. *Journal of radiological protection*, IOP Publishing, v. 28, n. 2, p. 161, 2008. <<https://doi.org/10.1088/0952-4746/28/2/R02>>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- 28 GRECHANUK, P. A. *Using Machine Learning to Predict MCNP Bias*. [S.l.], 2018. <<https://doi.org/10.2172/1416276>>. Citado na página 26.
- 29 WERNER, C. J. et al. MCNP6.2 Release Notes—report LA-UR-18-20808. *Los Alamos National Laboratory*, 2018. <<https://doi.org/10.2172/1419730>>. Citado 3 vezes nas páginas 26, 58 e 59.
- 30 YING, X. An overview of overfitting and its solutions. In: IOP PUBLISHING. *Journal of physics: Conference series*. [S.l.], 2019. v. 1168, p. 022022. <<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1168/2/022022>>. Citado na página 27.
- 31 GÖTZ, T. I. et al. A deep learning approach to radiation dose estimation. *Physics in Medicine & Biology*, IOP Publishing, v. 65, n. 3, p. 035007, 2020. <<https://doi.org/10.1088/1361-6560/ab65dc>>. Citado na página 27.
- 32 DOSOVITSKIY, A. An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale. *arXiv preprint arXiv:2010.11929*, 2020. Citado na página 27.
- 33 SOLBERG, T. D. et al. A review of radiation dosimetry applications using the mcnp monte carlo code. *Radiochimica Acta*, De Gruyter Oldenbourg Muenchen, D, v. 89, n. 4-5, p. 337–355, 2001. <<https://doi.org/10.1524/ract.2001.89.4-5.337>>. Citado na página 27.
- 34 GOODFELLOW, I. *Deep learning*. [S.l.]: MIT press, 2016. Citado na página 28.
- 35 ZOU, H.; HASTIE, T. Regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, Oxford University Press, v. 67, n. 2, p. 301–320, 2005. <<https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x>>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 47.
- 36 SUN, B. et al. A machine learning approach to the accurate prediction of monitor units for a compact proton machine. *Medical physics*, Wiley Online Library, v. 45, n. 5, p. 2243–2251, 2018. <<https://doi.org/10.1002/mp.12842>>. Citado na página 28.



- 37 PAN, S. J.; YANG, Q. A survey on transfer learning. *IEEE Transactions on knowledge and data engineering*, IEEE, v. 22, n. 10, p. 1345–1359, 2009. <<https://doi.org/10.1109/TKDE.2009.191>>. Citado na página 28.
- 38 LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. *nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 521, n. 7553, p. 436–444, 2015. <<http://dx.doi.org/10.1038/nature14539>>. Citado na página 28.
- 39 ESTEVA, A. et al. A guide to deep learning in healthcare. *Nature medicine*, Nature Publishing Group US New York, v. 25, n. 1, p. 24–29, 2019. <<https://doi.org/10.1038/s41591-018-0316-z>>. Citado na página 29.
- 40 SELLER, M. J. et al. Federated learning in medicine: facilitating multi-institutional collaborations without sharing patient data. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 10, n. 1, p. 12598, 2020. <<https://doi.org/10.1038/s41598-020-69250-1>>. Citado na página 29.
- 41 FUNK, R. K.; STOCKHAM, A. L.; LAACK, N. N. I. Basics of radiation therapy. *Clinical Cardio-Oncology*, Elsevier, p. 39–60, 2016. <<https://doi.org/10.1016/B978-0-323-44227-5.00003-X>>. Citado na página 30.
- 42 MIRHADI, A. J. Overview of radiation therapy terms and procedures in the management of thoracic malignancies. *Medical Management of the Thoracic Surgery Patient*, Saunders, p. 252, 2010. <<https://doi.org/10.1016/B978-1-4160-3993-8.00025-8>>. Citado na página 30.
- 43 ROBINSON, R. K. *Encyclopedia of food microbiology*. [S.l.]: Academic press, 2014. <<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-384730-0.00400-6>>. Citado na página 30.
- 44 AL-OKOUR, A. Radiation physics: Radiation interaction with matter. *Materials Today: Proceedings*, Elsevier, 2021. <<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.566>>. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- 45 PAUNESCU, T.; WOLOSCHAK, G. Genome effects and mutational risk of radiation. In: *Encyclopedia of Environmental Health*. [S.l.]: Elsevier, 2019. p. 233–244. <<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.09122-3>>. Citado na página 31.
- 46 ERDMANN, F.; GHANTOUS, A.; SCHÜZ, J. Environmental agents and childhood cancer. In: NRIAGU, J. (Ed.). *Encyclopedia of Environmental Health (Second Edition)*. Second edition. [S.l.]: Elsevier, 2019. p. 347–359. ISBN 978-0-444-63952-3. <<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.11725-7>>. Citado na página 31.
- 47 LAND, C. Ionizing radiation. *Encyclopedia Britannica*, 2022. Citado na página 31.
- 48 ANDREWS, L. et al. Food preservation using ionizing radiation. *Reviews of environmental contamination and toxicology*, Springer, p. 1–53, 1998. <[https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2208-8\\_1](https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2208-8_1)>. Citado na página 31.
- 49 SAX, K. The stimulation of plant growth by ionizing radiation. *Radiation Botany*, Elsevier, v. 3, n. 3, p. 179–186, 1963. <[https://doi.org/10.1016/S0033-7560\(63\)80014-9](https://doi.org/10.1016/S0033-7560(63)80014-9)>. Citado na página 31.

- 50 DONYA MOHAMED, e. a. Radiation in medicine: Origins, risks and aspirations. *Global Cardiology Science and Practice*, n. no. 4, p. 57, 2014. <<https://doi.org/10.5339/gcsp.2014.57>>. Citado na página 32.
- 51 CHATZIPAPAS, K. P. et al. Ionizing radiation and complex dna damage: Quantifying the radiobiological damage using monte carlo simulations. *Cancers*, MDPI, v. 12, n. 4, p. 799, 2020. <<https://doi.org/10.3390/cancers12040799>>. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 33.
- 52 MARAZZITI, D. et al. Neuropsychological testing in interventional cardiology staff after long-term exposure to ionizing radiation. *Journal of the International Neuropsychological Society*, Cambridge University Press, v. 21, n. 9, p. 670–676, 2015. <<https://doi.org/10.1017/S135561771500082X>>. Citado na página 33.
- 53 AUBERT, B. et al. Icrp publication 105. radiological protection in medicine. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- 54 JOHNSON, D. R. et al. Radiation protection in interventional radiology. *Clinical radiology*, Elsevier, v. 56, n. 2, p. 99–106, 2001. <<https://doi.org/10.1053/crad.2000.0640>>. Citado 3 vezes nas páginas 33, 34 e 35.
- 55 GORRY, P.; RAGOUET, P. Charles dotter and the birth of interventional radiology: A ‘sleeping-beauty’ with a restless sleep. *Radiology*, v. 46, p. 266–271, 2015. Citado na página 33.
- 56 KHONG, P. et al. Icrp publication 121: radiological protection in paediatric diagnostic and interventional radiology. *Annals of the ICRP*, Elsevier, v. 42, n. 2, p. 1–63, 2013. <<https://doi.org/10.1016/j.icrp.2012.10.001>>. Citado na página 33.
- 57 BITTL, J. A. Advances in coronary angioplasty. *New England Journal of Medicine*, Mass Medical Soc, v. 335, n. 17, p. 1290–1302, 1996. <<https://doi.org/10.1056/NEJM199610243351707>>. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- 58 WHOLEY, M. H. et al. Current global status of carotid artery stent placement. *Catheterization and cardiovascular diagnosis*, Wiley Online Library, v. 44, n. 1, p. 1–6, 1998. <[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0304\(199805\)44:1<1::AID-CCD1>3.0.CO;2-B](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0304(199805)44:1<1::AID-CCD1>3.0.CO;2-B)>. Citado na página 34.
- 59 O'BRIEN, B.; PUTTEN, W. Van der. Quantification of risk-benefit in interventional radiology. *Radiation protection dosimetry*, Oxford University Press, v. 129, n. 1-3, p. 59–62, 2008. <<https://doi.org/10.1093/rpd/ncn040>>. Citado na página 34.
- 60 WEISSE, C. W. et al. Potential applications of interventional radiology in veterinary medicine. *Journal of the American Veterinary Medical Association*, Am Vet Med Assoc, v. 233, n. 10, p. 1564–1574, 2008. <<https://doi.org/10.2460/javma.233.10.1564>>. Citado na página 34.
- 61 LÓPEZ, P. O. et al. Icrp publication 139: occupational radiological protection in interventional procedures. *Annals of the ICRP*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 47, n. 2, p. 1–118, 2018. <<https://doi.org/10.1016/j.jvir.2010.01.007>>. Citado na página 34.

- 62 (ANVISA), A. N. de V. S. Resolução rdc nº 611, de 9 de março de 2022. *Diário Oficial da União*, v. 1, n. 611, p. 1–10, 2022. Citado na página 34.
- 63 WALL, B. Radiation protection dosimetry for diagnostic radiology patients. *Radiation protection dosimetry*, Oxford University Press, v. 109, n. 4, p. 409–419, 2004. <<https://doi.org/10.1093/rpd/nch317>>. Citado na página 35.
- 64 SÁNCHEZ, R. M. et al. Staff doses in interventional radiology: a national survey. *Journal of vascular and interventional radiology*, Elsevier, v. 23, n. 11, p. 1496–1501, 2012. <<https://doi.org/10.1016/j.jvir.2012.05.056>>. Citado na página 35.
- 65 ROSE, A.; RAE, W. I. D. Personal protective equipment availability and utilization among interventionalists. *Safety and Health at Work*, Elsevier, v. 10, n. 2, p. 166–171, 2019. <<https://doi.org/10.1016/j.shaw.2018.10.001>>. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 36.
- 66 HINE, G. J.; BROWNELL, G. L. *Radiation dosimetry*. [S.l.]: Elsevier, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.
- 67 GREENING, J. R. *Fundamentals of radiation dosimetry*. [S.l.]: CRC Press, 2017. <<https://doi.org/10.1201/9780203755198>>. Citado na página 37.
- 68 POTTER, C. A. Internal dosimetry—a review. *Health physics*, LWW, v. 87, n. 5, p. 455–468, 2004. Citado na página 37.
- 69 AINSBURY, E. et al. Review of retrospective dosimetry techniques for external ionising radiation exposures. *Radiation protection dosimetry*, Oxford University Press, v. 147, n. 4, p. 573–592, 2011. <<https://doi.org/10.1093/rpd/ncq499>>. Citado na página 37.
- 70 HUNT, J. et al. Visual monte carlo and its application to internal and external dosimetry. In: *Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications*. [S.l.]: Springer, 2001. p. 345–350. <[https://doi.org/10.1007/978-3-642-18211-2\\_55](https://doi.org/10.1007/978-3-642-18211-2_55)>. Citado na página 37.
- 71 MENZEL, H.-G. International commission on radiation units and measurements. *Journal of the ICRU*, Oxford University Press, v. 14, n. 2, p. 1–2, 2014. <<https://doi.org/10.1093/jicru/ndw040>>. Citado na página 38.
- 72 ICRU. *Fundamental quantities and units for ionizing radiation*. [S.l.]: International Commission on Radiation Units, 1998. v. 60. <<https://doi.org/10.1093/jicru/ndr011>>. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- 73 PEREZ, H. E. B. Desenvolvimento de um sistema calorimétrico para dosimetria de feixes de elétrons em processos por radiação. *Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear)*, 1994. Citado na página 38.
- 74 HARRISON, J.; STREFFER, C. The icrp protection quantities, equivalent and effective dose: their basis and application. *Radiation protection dosimetry*, Oxford University Press, v. 127, n. 1-4, p. 12–18, 2007. <<https://doi.org/10.1093/rpd/ncm248>>. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- 75 STREFFER, C. The ICRP 2007 recommendations. *Radiation Protection Dosimetry*, Oxford University Press, v. 127, n. 1-4, p. 2–7, 2007. <<https://doi.org/10.1093/rpd/ncm246>>. Citado na página 39.

- 76 ANDREO, P. Monte carlo simulations in radiotherapy dosimetry. *Radiation Oncology*, BioMed Central, v. 13, n. 1, p. 1–15, 2018. <<https://doi.org/10.1186/s13014-018-1065-3>>. Citado na página 39.
- 77 BENOVA, D. M. The Manhattan Project, the first electronic computer and the Monte Carlo method. *Monte Carlo Methods and Applications*, De Gruyter, v. 22, n. 1, p. 73–79, 2016. <<https://doi.org/10.1515/mcma-2016-0102>>. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- 78 YORIYAZ, H. Método de Monte Carlo: princípios e aplicações em Física Médica. *Revista Brasileira de Física Médica*, v. 3, n. 1, p. 141–149, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- 79 ANDREO, P. Monte Carlo techniques in medical radiation physics. *Physics in Medicine & Biology*, IOP Publishing, v. 36, n. 7, p. 861, 1991. <<https://doi.org/10.1088/0031-9155/36/7/001>>. Citado na página 40.
- 80 ROGERS, D. Fifty years of Monte Carlo simulations for Medical Physics. *Physics in Medicine & Biology*, IOP Publishing, v. 51, n. 13, p. R287, 2006. <<https://doi.org/10.1088/0031-9155/51/13/R17>>. Citado na página 40.
- 81 KROESE, D. P. et al. Why the monte carlo method is so important today. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, Wiley Online Library, v. 6, n. 6, p. 386–392, 2014. <<https://doi.org/10.1002/wics.1314>>. Citado na página 41.
- 82 SEMPAAU, J. et al. Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, Elsevier, v. 207, n. 2, p. 107–123, 2003. <[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)00453-1](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00453-1)>. Citado na página 41.
- 83 SARRUT, D. et al. A review of the use and potential of the GATE Monte Carlo simulation code for radiation therapy and dosimetry applications. *Medical Physics*, Wiley Online Library, v. 41, n. 6Part1, p. 064301, 2014. <<https://doi.org/10.1118/1.4871617>>. Citado na página 41.
- 84 VASSILIEV, O. N. Monte carlo methods for radiation transport. *Fundamentals and Advanced Topics*, Springer, 2017. Citado na página 41.
- 85 JR, J. A. F. *The Calculation of Nonlinear Radiation Transport by a Monte Carlo Method*. [S.l.], 1961. Citado na página 41.
- 86 SOOD, A. The monte carlo method and mcnp-a brief review of our 40 year history. In: *Topical Meeting on Industrial Radiation and Radioisotope Measurement-Applications Conference, Chicago*. [S.l.: s.n.], 2017. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 58.
- 87 HUNT, J. et al. Application of voxel phantoms and monte carlo methods to internal and external dosimetry. In: *Proc. 10th Congress of the International Radiation Protection Association, IRPA10 (Hiroshima, Japan, 14–19 May 2000)*. [S.l.: s.n.], 2000. Citado na página 42.
- 88 SIISKONEN, T. et al. Monte carlo simulations of occupational radiation doses in interventional radiology. *The British journal of radiology*, British Institute of Radiology, v. 80, n. 954, p. 460–468, 2007. <<https://doi.org/10.1259/bjr/26692771>>. Citado na página 42.

- 89 MONARD, M. C.; BARANAUSKAS, J. A. Conceitos sobre aprendizado de máquina. *Sistemas inteligentes-Fundamentos e aplicações*, v. 1, n. 1, p. 32, 2003. Citado na página 42.
- 90 NASTESKI, V. An overview of the supervised machine learning methods. *Horizons*, v. 4, p. 51–62, 2017. Citado na página 42.
- 91 NAQA, I. E.; MURPHY, M. J. *Machine and deep learning in oncology, medical physics and radiology*. [S.l.]: Springer, 2022. <<https://doi.org/10.1007/978-3-030-83047-2>>. Citado na página 42.
- 92 MAHESH, B. Machine learning algorithms-a review. *International Journal of Science and Research (IJSR)*. [Internet], v. 9, n. 1, p. 381–386, 2020. <<https://doi.org/10.21275/ART20203995>>. Citado na página 42.
- 93 MUHAMMAD, I.; YAN, Z. Supervised machine learning approaches: A survey. *ICTACT Journal on Soft Computing*, v. 5, n. 3, 2015. <<https://doi.org/10.21917/ijsc.2015.0133>>. Citado na página 42.
- 94 SINGH, V. et al. Impact of train/test sample regimen on performance estimate stability of machine learning in cardiovascular imaging. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 11, n. 1, p. 14490, 2021. <<https://doi.org/10.1038/s41598-021-93651-5>>. Citado na página 43.
- 95 RAMEZAN, C. A. et al. Effects of training set size on supervised machine-learning land-cover classification of large-area high-resolution remotely sensed data. *Remote Sensing*, MDPI, v. 13, n. 3, p. 368, 2021. <<https://doi.org/10.3390/rs13030368>>. Citado na página 43.
- 96 RASCHKA, S.; MIRJALILI, V. *Python machine learning: Machine learning and deep learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2*. [S.l.]: Packt publishing ltd, 2019. Citado na página 43.
- 97 MURAINA, I. Ideal dataset splitting ratios in machine learning algorithms: general concerns for data scientists and data analysts. In: *7th international Mardin Artuklu scientific research conference*. [S.l.: s.n.], 2022. p. 496–504. Citado na página 43.
- 98 JABBAR, H.; KHAN, R. Z. Methods to avoid over-fitting and under-fitting in supervised machine learning (comparative study). *Computer Science, Communication and Instrumentation Devices*, Res. Publ Singapore, v. 70, n. 10.3850, p. 978–981, 2015. Citado na página 43.
- 99 ARLOT, S.; CELISSE, A. A survey of cross-validation procedures for model selection. 2010. <<https://doi.org/10.1214/09-SS054>>. Citado na página 44.
- 100 WONG, T.-T.; YEH, P.-Y. Reliable accuracy estimates from k-fold cross validation. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, IEEE, v. 32, n. 8, p. 1586–1594, 2019. <<https://doi.org/10.1109/TKDE.2019.2912815>>. Citado na página 44.
- 101 MAULUD, D.; ABDULAZEEZ, A. M. A review on linear regression comprehensive in machine learning. *Journal of Applied Science and Technology Trends*, v. 1, n. 2, p. 140–147, 2020. <<https://doi.org/10.38094/jastt1457>>. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.



- 102 SAFI, S. K. et al. Optimizing linear regression models with lasso and ridge regression: A study on uae financial behavior during covid-19. *Migration Letters*, v. 20, n. 6, p. 139–153, 2023. Citado na página 45.
- 103 CHAKRAVARTY, S.; DEMIRHAN, H.; BASER, F. Fuzzy regression functions with a noise cluster and the impact of outliers on mainstream machine learning methods in the regression setting. *Applied Soft Computing*, Elsevier, v. 96, p. 106535, 2020. <<https://doi.org/10.1016/j.asoc.2020.106535>>. Citado na página 45.
- 104 OGUTU, J. O.; SCHULZ-STREECK, T.; PIEPHO, H.-P. Genomic selection using regularized linear regression models: ridge regression, lasso, elastic net and their extensions. In: SPRINGER. *BMC proceedings*. [S.l.], 2012. v. 6, p. 1–6. <<https://doi.org/10.1186/1753-6561-6-S2-S10>>. Citado na página 46.
- 105 MUTHUKRISHNAN, R.; ROHINI, R. Lasso: A feature selection technique in predictive modeling for machine learning. In: IEEE. *2016 IEEE international conference on advances in computer applications (ICACA)*. [S.l.], 2016. p. 18–20. <<https://doi.org/10.1109/ICACA.2016.7887916>>. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- 106 RAJAN, M. An efficient ridge regression algorithm with parameter estimation for data analysis in machine learning. *SN Computer Science*, Springer, v. 3, n. 2, p. 171, 2022. <<https://doi.org/10.1007/s42979-022-01051-x>>. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.
- 107 JIANG, T.; GRADUS, J. L.; ROSELLINI, A. J. Supervised machine learning: a brief primer. *Behavior therapy*, Elsevier, v. 51, n. 5, p. 675–687, 2020. <<https://doi.org/10.1016/j.beth.2020.05.002>>. Citado na página 47.
- 108 SUTHAHARAN, S.; SUTHAHARAN, S. Decision tree learning. *Machine Learning Models and Algorithms for Big Data Classification: Thinking with Examples for Effective Learning*, Springer, p. 237–269, 2016. <[https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7641-3\\_10](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7641-3_10)>. Citado na página 47.
- 109 JIAO, S.; SONG, J.; LIU, B. A review of decision tree classification algorithms for continuous variables. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2020. v. 1651, n. 1, p. 012083. <<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1651/1/012083>>. Citado na página 47.
- 110 QUINLAN, J. R. Induction of decision trees. *Machine learning*, Springer, v. 1, p. 81–106, 1986. <<https://doi.org/10.1007/BF00116251>>. Citado na página 48.
- 111 LOH, W.-Y. Classification and regression trees. *Wiley interdisciplinary reviews: data mining and knowledge discovery*, Wiley Online Library, v. 1, n. 1, p. 14–23, 2011. <<https://doi.org/10.1002/widm.8>>. Citado na página 48.
- 112 BIAU, G.; SCORNET, E. A random forest guided tour. *Test*, Springer, v. 25, p. 197–227, 2016. <<https://doi.org/10.1007/s11749-016-0481-7>>. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 49.
- 113 RIGATTI, S. J. Random forest. *Journal of Insurance Medicine*, American Academy of Insurance Medicine 1700 Magnavox Way, Fort Wayne, IN 46804, v. 47, n. 1, p. 31–39, 2017. <<https://doi.org/10.17849/insm-47-01-31-39.1>>. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 49.

- 114 KE, G. et al. Lightgbm: A highly efficient gradient boosting decision tree. *Advances in neural information processing systems*, v. 30, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.
- 115 ASSELMAN, A.; KHALDI, M.; AAMMOU, S. Enhancing the prediction of student performance based on the machine learning xgboost algorithm. *Interactive Learning Environments*, Taylor & Francis, v. 31, n. 6, p. 3360–3379, 2023. <<https://doi.org/10.1080/10494820.2021.1928235>>. Citado na página 50.
- 116 NIELSEN, D. *Tree boosting with xgboost-why does xgboost win "every" machine learning competition?* Dissertação (Mestrado) — NTNU, 2016. Citado na página 50.
- 117 VAPNIK, V. *The nature of statistical learning theory*. [S.l.]: Springer science & business media, 2013. Citado na página 51.
- 118 SMOLA, A. J.; SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. *Statistics and computing*, Springer, v. 14, p. 199–222, 2004. <<https://doi.org/10.1023/B:STCO.0000035301.49549.88>>. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 52.
- 119 LU, C.-J.; LEE, T.-S.; CHIU, C.-C. Financial time series forecasting using independent component analysis and support vector regression. *Decision support systems*, Elsevier, v. 47, n. 2, p. 115–125, 2009. <<https://doi.org/10.1016/j.dss.2009.02.001>>. Citado na página 52.
- 120 SHAO, W. et al. Fast prediction of patient-specific organ doses in brain ct scans using support vector regression algorithm. *Physics in Medicine & Biology*, IOP Publishing, v. 69, n. 2, p. 025010, 2024. <<https://doi.org/10.1088/1361-6560/ad14c7>>. Citado na página 52.
- 121 MAQBOOL, J. et al. Stock prediction by integrating sentiment scores of financial news and mlp-regressor: A machine learning approach. *Procedia Computer Science*, Elsevier, v. 218, p. 1067–1078, 2023. <<https://doi.org/10.1016/j.procs.2023.01.086>>. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 65.
- 122 DECASTRO-GARCÍA, N. et al. Effect of the sampling of a dataset in the hyperparameter optimization phase over the efficiency of a machine learning algorithm. *Complexity*, Wiley Online Library, v. 2019, n. 1, p. 6278908, 2019. <<https://doi.org/10.1155/2019/6278908>>. Citado na página 53.
- 123 AGARAP, A. Deep learning using rectified linear units (relu). *arXiv preprint arXiv:1803.08375*, 2018. <<https://doi.org/10.48550/arXiv.1803.08375>>. Citado na página 53.
- 124 NAIR, V.; HINTON, G. E. Rectified linear units improve restricted boltzmann machines. In: *Proceedings of the 27th international conference on machine learning (ICML-10)*. [S.l.: s.n.], 2010. p. 807–814. Citado na página 53.
- 125 ALSHAREF, A. et al. Review of ml and automl solutions to forecast time-series data. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Springer, v. 29, n. 7, p. 5297–5311, 2022. <<https://doi.org/10.1007/s11831-022-09765-0>>. Citado na página 54.
- 126 KARMAKER, S. K. et al. Automl to date and beyond: Challenges and opportunities. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, ACM New York, NY, v. 54, n. 8, p. 1–36, 2021. <<https://doi.org/10.1145/3470918>>. Citado na página 54.

- 127 KOUTSANDREAS, D. et al. On the selection of forecasting accuracy measures. *Journal of the Operational Research Society*, Taylor & Francis, v. 73, n. 5, p. 937–954, 2022. <<https://doi.org/10.1080/01605682.2021.1892464>>. Citado 2 vezes nas páginas 54 e 55.
- 128 QI, J. et al. On mean absolute error for deep neural network based vector-to-vector regression. *IEEE Signal Processing Letters*, IEEE, v. 27, p. 1485–1489, 2020. <<https://doi.org/10.1109/LSP.2020.3016837>>. Citado na página 55.
- 129 WILLMOTT, C. J.; MATSUURA, K. Advantages of the mean absolute error (mae) over the root mean square error (rmse) in assessing average model performance. *Climate research*, v. 30, n. 1, p. 79–82, 2005. <<https://doi.org/10.3354/cr030079>>. Citado na página 55.
- 130 FOSS, T.; MYRTVEIT, I.; STENSRUD, E. Mre and heteroscedasticity: An empirical validation of the assumption of homoscedasticity of the magnitude of relative error. In: *Proc. ESCOM, 12th European software control and metrics conference. The Netherlands*. [S.l.: s.n.], 2001. p. 157–164. Citado na página 56.
- 131 HYNDMAN, R. *Forecasting: principles and practice*. [S.l.]: OTexts, 2018. Citado na página 56.
- 132 WANG, W.; LU, Y. Analysis of the mean absolute error (mae) and the root mean square error (rmse) in assessing rounding model. In: IOP PUBLISHING. *IOP conference series: materials science and engineering*. [S.l.], 2018. v. 324, p. 012049. <<https://doi.org/10.1088/1757-899X/324/1/012049>>. Citado na página 56.
- 133 REDELL, N. Shapley decomposition of r-squared in machine learning models. *arXiv preprint arXiv:1908.09718*, 2019. <<https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.09718>>. Citado na página 56.
- 134 CHICCO, D.; WARRENS, M. J.; JURMAN, G. The coefficient of determination r-squared is more informative than smape, mae, mape, mse and rmse in regression analysis evaluation. *PeerJ computer science*, PeerJ Inc., v. 7, p. e623, 2021. <<https://doi.org/10.7717/peerj-cs.623>>. Citado na página 57.
- 135 WERNER, C. *MCNP Users Manual-Code Version 6.2, LANL*. [S.l.], 2017. Citado na página 59.
- 136 CASSOLA, V. et al. Fash and mash: female and male adult human phantoms based on polygon mesh surfaces: I. development of the anatomy. *Physics in Medicine & Biology*, IOP Publishing, v. 55, n. 1, p. 133, 2009. <<https://doi.org/10.1088/0031-9155/55/1/009>>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 68.
- 137 BRICENO, L.; PAUL, G. Makehuman: a review of the modelling framework. In: SPRINGER. *Congress of the International Ergonomics Association*. [S.l.], 2018. p. 224–232. <[https://doi.org/10.1007/978-3-319-96077-7\\_23](https://doi.org/10.1007/978-3-319-96077-7_23)>. Citado na página 59.
- 138 HESS, R. *Blender Foundations: The Essential Guide to Learning Blender 2.5*. [S.l.]: Routledge, 2013. <<https://doi.org/10.4324/9780240814315>>. Citado na página 59.
- 139 MIN, P. Bivox 3d mesh voxelizer. Available on: <http://www.cs.princeton.edu/min/bivox>, v. 6, 2004. Citado na página 59.



- 140 FERREIRA, T.; RASBAND, W. Imagej user guide. *ImageJ/Fiji*, v. 1, p. 155–161, 2012. Citado na página 59.
- 141 VANROSSUM, G. Python reference manual. *Department of Computer Science [CS]*, CWI, n. R 9525, 1995. Citado na página 59.
- 142 GRIGOROV, D. Harnessing python 3.11 and python libraries for llm development. In: *Introduction to Python and Large Language Models: A Guide to Language Models*. [S.l.]: Springer, 2024. p. 303–368. <[https://doi.org/10.1007/979-8-8688-0540-0\\_7](https://doi.org/10.1007/979-8-8688-0540-0_7)>. Citado na página 59.
- 143 LAPPONI, J. C. *Estatística usando excel*. [S.l.]: Elsevier Brasil, 2005. Citado na página 60.
- 144 HACKELING, G. *Mastering Machine Learning with Scikit-learn*. [S.l.]: Packt Publishing, Birmingham, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 62.
- 145 AHMED, H.; LOFSTEAD, J. Managing randomness to enable reproducible machine learning. In: *Proceedings of the 5th International Workshop on practical reproducible evaluation of computer systems*. [S.l.: s.n.], 2022. p. 15–20. Citado na página 61.
- 146 STOJILJKOVIC, M. Linear regression in python. *Real Python*, v. 8, 2021. Citado na página 62.
- 147 MONTESINOS-LÓPEZ, O. A. et al. A bayesian genomic multi-output regressor stacking model for predicting multi-trait multi-environment plant breeding data. *G3: Genes, Genomes, Genetics*, Oxford University Press, v. 9, n. 10, p. 3381–3393, 2019. <<https://doi.org/10.1534/g3.119.400336>>. Citado na página 62.
- 148 RANSTAM, J.; COOK, J. A. Lasso regression. *Journal of British Surgery*, Oxford University Press, v. 105, n. 10, p. 1348–1348, 2018. <<https://doi.org/10.1002/bjs.10895>>. Citado na página 63.
- 149 GILL, K. S.; GUPTA, R. Chronic kidney disease detection using gridsearchcv cross validation method. In: IEEE. *2023 International Conference on Recent Advances in Electrical, Electronics & Digital Healthcare Technologies (REEDCON)*. [S.l.], 2023. p. 318–322. <<https://doi.org/10.1109/REEDCON57544.2023.10151392>>. Citado na página 63.
- 150 MCDONALD, G. C. Ridge regression. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, Wiley Online Library, v. 1, n. 1, p. 93–100, 2009. <<https://doi.org/10.1002/wics.14>>. Citado na página 63.
- 151 HANS, C. Elastic net regression modeling with the orthant normal prior. *Journal of the American Statistical Association*, Taylor & Francis, v. 106, n. 496, p. 1383–1393, 2011. <<https://doi.org/10.1198/jasa.2011.tm09241>>. Citado na página 63.
- 152 LUO, H. et al. Sdtr: Soft decision tree regressor for tabular data. *IEEE Access*, IEEE, v. 9, p. 55999–56011, 2021. <<https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3070575>>. Citado na página 64.

- 153 YERRABOLU, V. L. et al. Performance comparison of random forest regressor and support vector regression for solar energy prediction. In: IOP PUBLISHING. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. [S.l.], 2024. v. 1375, n. 1, p. 012013. <<https://doi.org/10.1088/1755-1315/1375/1/012013>>. Citado na página 64.
- 154 CHITTILAPPILLY, R. M.; SURESH, S.; SHANMUGAM, S. A comparative analysis of optimizing medical insurance prediction using genetic algorithm and other machine learning algorithms. In: IEEE. *2023 International Conference on Advances in Computing, Communication and Applied Informatics (ACCAI)*. [S.l.], 2023. p. 1–6. <<https://doi.org/10.1109/ACCAI58221.2023.10199979>>. Citado na página 64.
- 155 KRAISANGKA, J. et al. Application of machine learning in daily reservoir inflow prediction of the bhumibol dam, thailand. In: IEEE. *2022 19th International Conference on Electrical Engineering/Electronics, Computer, Telecommunications and Information Technology (ECTI-CON)*. [S.l.], 2022. p. 1–4. <<https://doi.org/10.1109/ECTI-CON54298.2022.9795552>>. Citado na página 65.
- 156 RAMEDANI, Z. et al. Potential of radial basis function based support vector regression for global solar radiation prediction. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 39, p. 1005–1011, 2014. <<https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.07.108>>. Citado na página 65.
- 157 DUTT, M. I.; SAADEH, W. A multilayer perceptron (mlp) regressor network for monitoring the depth of anesthesia. In: IEEE. *2022 20th IEEE Interregional NEWCAS Conference (NEWCAS)*. [S.l.], 2022. p. 251–255. <<https://doi.org/10.1109/NEWCAS52662.2022.9842242>>. Citado na página 65.
- 158 OLSON, R. S.; MOORE, J. H. Tpot: A tree-based pipeline optimization tool for automating machine learning. In: PMLR. *Workshop on automatic machine learning*. [S.l.], 2016. p. 66–74. Citado na página 66.
- 159 HUNTINGTON, T. et al. Machine learning for surrogate process models of bioproduction pathways. *Bioresource Technology*, Elsevier, v. 370, p. 128528, 2023. <<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.128528>>. Citado na página 66.
- 160 OLIPHANT, T. E. et al. *Guide to numpy*. [S.l.]: Trelgol Publishing USA, 2006. v. 1. Citado na página 67.
- 161 MCCONN, R. J. et al. *Compendium of material composition data for radiation transport modeling*. [S.l.], 2011. <<https://doi.org/10.2172/1023125>>. Citado na página 68.
- 162 CRANLEY, K. Catalogue of diagnostic x-ray spectra and data. *IPEM report*, v. 78, 1997. <[https://doi.org/10.1016/S1078-8174\(98\)80053-9](https://doi.org/10.1016/S1078-8174(98)80053-9)>. Citado na página 68.