

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
GRADUAÇÃO EM FÍSICA MÉDICA

WILLIAN KENJI SILVA NAKANO

DESENVOLVIMENTO DO SOFTWARE DOSECV

UBERLÂNDIA
2025

WILLIAN KENJI SILVA NAKANO

DESENVOLVIMENTO DO SOFTWARE DOSECV

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação Física Médica do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como requisito para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Prof^ª. Dra. Ana Paula Perini

Coorientador: Dr. Válter José Coutinho Júnior

UBERLÂNDIA

2025

WILLIAN KENJI SILVA NAKANO

DESENVOLVIMENTO DO SOFTWARE DOSECV

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do Título de “Bacharel em Física Médica” e aprovado em sua forma final pelo Curso de Graduação em Física Médica.

UBERLÂNDIA, 05 de Maio de 2025.

Banca Examinadora:

Prof^ª. Dra. Ana Paula Perini

Dra. Isabella Pereira Tobias

Dr. Lucas Wilian Gonçalves de Souza

Dedico este trabalho à minha mãe e à minha irmã, pelo
amor incondicional, apoio constante e por sempre
acreditarem em mim, mesmo nos momentos mais difíceis.
Sem vocês, esta conquista não seria possível.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a todos os professores que fizeram parte da minha formação ao longo da graduação, por cada ensinamento transmitido e pelo incentivo constante ao conhecimento.

Aos meus orientadores, Profa. Dra. Ana Paula Perini e Prof. Dr. Lucio Pereira Neves, pela confiança, orientação, amizade e apoio fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu coorientador e amigo, Válder José Coutinho Júnior, pela parceria, conversas, amizade e, sobretudo, pelo convite que tornou este projeto possível. Sem ele, este trabalho sequer existiria.

Agradeço também à banca avaliadora, Isabella e Lucas, pela disponibilidade e por aceitarem contribuir com a avaliação deste trabalho.

À minha companheira, Joyce, por estar sempre ao meu lado com carinho, paciência e incentivo. À minha mãe, Marcia, à minha irmã, Thais, e minha avó, Maria, por todo o amor e apoio incondicional ao longo da minha vida.

Por fim, deixo meu sincero agradecimento aos amigos que fizeram parte dessa caminhada, direta ou indiretamente, com apoio, companheirismo, amizade e bons momentos: Analice, Caio, Douglas, Evelyn, Felipe, Gabriel, Giovani, Guilherme, João, Kalinda, Karen, Lívio, Lucas e Luis e a todos os outros que, de alguma forma, contribuíram para tornar essa trajetória mais leve e memorável.

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Universidade Federal de Uberlândia (UFU) e pelas agências de fomento:

- Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais – FAPEMIG: APQ-04215-22; APQ-01254-23; APQ-04348-23;

- Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq): Bolsa de Produtividade em Pesquisa 312124/2021-0 (Ana Paula Perini); Bolsa de Produtividade em Pesquisa 312160/2023-2 (Lucio Pereira Neves); Projeto UNIVERSAL 407493/2021-2.

Este trabalho faz parte do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia para Instrumentação Nuclear e Aplicações na Indústria e Saúde (INCT/INAIS), projeto CNPq, 406303/2022-3.

“As coisas que um dia imaginei como minhas maiores conquistas foram apenas os primeiros passos rumo a um futuro que só agora começo a vislumbrar” -Jace Beleren, Magic: The Gathering, 2012

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento do software DoseCV, uma ferramenta gratuita e de uso não comercial voltada para o processamento automatizado de dados de simulações no MCNP que utilizam os Objetos Simuladores Computacionais Adultos de Referência do Tipo Malha (MRCPs) descritos na Publicação 145 da ICRP, realizando os cálculos e fornecendo Coeficientes de Dose (DC), Coeficientes de Conversão de Doses Equivalente (CC[HT]) e Efetiva (CC[E]) e Doses Equivalente e Efetiva ao usuário. O programa foi desenvolvido com o objetivo de facilitar e padronizar a extração de resultados a partir dos arquivos de saída do código MCNP, reduzindo a possibilidade de erros humanos e otimizando o tempo empregado em análises repetitivas. O DoseCV realiza a leitura dos dados simulados, aplica os fatores de normalização e calcula automaticamente a grandeza dosimétrica selecionada pelo usuário, com base nas convenções da ICRP, apresentando os resultados em diferentes níveis de granularidade. Além disto, o software pode ser implementado em outros códigos Monte Carlo, mediante pequenas alterações. A validação da ferramenta foi realizada através da tese de doutorado do discente Valter José Coutinho Júnior, por meio de comparações com dados da Publicação 116 da ICRP, resultando em um erro relativo inferior a 5% para a maioria dos tecidos simulados em objetos simuladores antropomórficos adultos feminino e masculino. Esses resultados demonstram a confiabilidade do DoseCV em estudos de dosimetria numérica. Assim, o DoseCV representa uma contribuição significativa para a automação, padronização e reprodutibilidade de estudos na área de Física Médica e áreas correlatas.

Palavras-chave: Dosimetria Numérica; MCNP; MRCP; ICRP; Python.

ABSTRACT

This work presents the development of the DoseCV software, a free and non-commercial tool aimed at the automated processing of data from simulations in the MCNP code that use the Mesh-type Reference Computational Phantoms (MRCPs) described in ICRP Publication 145. The software performs calculations and provides Dose Coefficients (DC), Conversion Coefficients for Equivalent Dose (CC[HT]) and Effective Dose (CC[E]), as well as the Equivalent and Effective Doses to the user. The program was developed with the goal of facilitating and standardizing the extraction of results from the output files of the MCNP code, reducing the likelihood of human errors, and optimizing the time spent on repetitive analyses. DoseCV reads the simulated data, applies normalization factors, and automatically calculates the dosimetric quantity selected by the user, based on the conventions of the ICRP, presenting the results at different levels of granularity. Furthermore, the software can be implemented in other Monte Carlo codes with minor modifications. The tool was validated through the doctoral thesis of the student Valter José Coutinho Júnior, by means of comparisons with data from ICRP Publication 116, resulting in a relative error of less than 5% for most tissues simulated in anthropomorphic adult female and male phantoms. These results demonstrate the reliability of DoseCV in numerical dosimetry studies. Thus, DoseCV represents a significant contribution to the automation, standardization, and reproducibility of studies in the field of Medical Physics and related areas.

Keywords: Numerical Dosimetry; MCNP; MRCP; ICRP; Python.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Exemplo do arquivo tally	23
Figura 2 – Exemplo do arquivo de saída mctal	24
Figura 3 – Fluxograma de cálculos aplicados no DoseCV	27
Figura 4 – Tela principal do DoseCV	31
Figura 5 – Tela DoseCV: Documentação	31
Figura 6 – Tela DoseCV: Sobre	31
Figura 7 – Tela DoseCV: Cálculo de DC	32
Figura 8 – Tela DoseCV: Cálculo de CC[HT], CC[E] ou Ht e E	32
Figura 9 – Fluxograma do funcionamento do DoseCV: ponto de vista do usuário	33
Figura 10 – Certificado de Menção Honrosa recebida pelo trabalho no I SIMPOSIO REPROLAM	35
Figura 11 – Captura de tela da publicação do artigo na revista Applied Radiation and Isotopes	36

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Cabeçalho da tabela: Órgãos, tecidos e outros	19
Tabela 2 – Cabeçalho da tabela: Tecidos Esqueléticos	19

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CC	Coeficiente de Conversão
DC	Coeficiente de Dose
DF	DataFrame
GUI	Interface Gráfica do Usuário
IA	Inteligência Artificial
ICRP	Comissão Internacional de Proteção Radiológica
MCNP	Monte Carlo N-Particle
MRCs	Objetos Simuladores Computacionais Adultos de Referência do Tipo Malha
PKA	Produto Kerma Área

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	OBJETIVOS	14
2.1	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	14
3	REFERENCIAL TEÓRICO	15
3.1	PRINCÍPIOS DE DOSIMETRIA DE RADIAÇÃO	15
3.2	BASES DE DADOS DE MATERIAIS	18
3.3	PYTHON E BIBLIOTECAS UTILIZADAS	19
4	DESENVOLVIMENTO	21
4.1	ESTRUTURA E ARQUITETURA DO CÓDIGO	21
4.2	LEITURA DOS ARQUIVOS E PRÉ PROCESSAMENTO DE DADOS	21
4.2.1	Compreensão da estrutura dos arquivos tally e mctal	22
4.2.2	Leitura e Pré-Processamento de dados	24
4.2.3	Cálculos	25
4.3	INTERFACE GRÁFICA (GUI)	27
4.4	COMPILAÇÃO DO EXECUTÁVEL	28
4.5	DOCUMENTAÇÃO	29
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	30
5.1	DOSECV	30
5.2	DOCUMENTAÇÃO	33
5.3	VALIDAÇÃO DO DOSECV	34
5.4	DIVULGAÇÃO CIENTÍFICA E SUBMISSÃO DO TRABALHO . . .	34
6	CONCLUSÃO	37
	REFERÊNCIAS	38
	APÊNDICE A – Documentação do Dose CV	42

1 INTRODUÇÃO

A dosimetria numérica desempenha um papel fundamental na proteção radiológica, sendo responsável por mensurar a transferência de energia para um determinado meio. A busca por novas tecnologias no mundo científico é contínua, visando aumentar a confiabilidade de todos os resultados encontrados. Dentre as abordagens mais comuns, é possível destacar o desenvolvimento de novos objetos simuladores que permitem aplicações tanto em pesquisas teóricas quanto em cenários práticos, contribuindo para a otimização da segurança e eficácia dos procedimentos da radiologia (SOUZA LALIC *et al.*, 2019).

Entre as instituições que se destacam na produção de publicações sobre a proteção radiológica, a Comissão Internacional de Proteção Radiológica (ICRP) ocupa um papel de destaque. Fundada em 1928 no Congresso Internacional de Radiologia, a ICRP é uma organização não governamental e independente de caráter científico, cujo objetivo é fornecer diretrizes, recomendações e divulgações de novas tecnologias para a segurança radiológica a nível global. Na Publicação 145 (2020), intitulada *Adult Mesh-type Reference Computational Phantoms*, a ICRP introduziu os Objetos Simuladores Computacionais Adultos de Referência do Tipo Malha (MRCPs), conforme tradução em português. Estes novos modelos, construídos a partir de malhas poligonais, representam um avanço significativo para a temática de simulações computacionais para dosimetria, proporcionando uma maior precisão na modelagem da interação da radiação com o tecido humano (ICRP, 2020).

Para realizar os cálculos de dosimetria numérica sem a necessidade de experimentos reais, é possível utilizar uma metodologia de transporte de partículas que permita a simulação da deposição de energia em tecidos biológicos. Um dos códigos de Monte Carlo mais utilizados é o MCNP (Monte Carlo N-Particle), que teve seu início de desenvolvimento datado em 1940, no Laboratório Nacional de Los Alamos (LANL) (KULESZA *et al.*, 2022). O MCNP tem como objetivo realizar o rastreamento de diferentes tipos de partículas em uma ampla faixa de energias, o que permite resultados de interação da radiação com a matéria a partir de iterações probabilísticas sem exposição real à radiação. Ele possui aplicações em diferentes áreas, como: proteção radiológica; blindagem contra radiação; controle de qualidade; radioterapia; entre outros (FORSTER III; RISING; SOOD, 2021).

A conversão dos resultados dessas simulações em valores de dose apresenta desafios significativos quando realizada manualmente, tornando o processo complexo, propenso a erros e também demorado. Este processo envolve o tratamento de arquivos de entrada e saída da simulação (respectivamente, extensões *tally* e *mctal*) que possuem formatos não triviais, sendo necessárias manipulações através do uso de planilhas eletrônicas ou programas semelhantes focados em processamento de dados. Essa abordagem está sujeita a falhas humanas, como: leitura e interpretação dos dados; erros de transcrição; aplicação incorreta de fatores de normalização; cálculos incorretos; dificuldades na identificação dos parâmetros adequados para cada simulação.

Tendo em vista que a disponibilização gratuita dos MRCPs é recente (2022), a tarefa de processamento de dados para a obtenção dos resultados de uma simulação se torna ainda mais desafiadora, dado que é necessário entender as particularidades intrínsecas das simulações com estes objetos. Desta forma, a falta de uma ferramenta padronizada e confiável para este tipo de tarefa dificulta a análise e reprodutibilidade de estudos, uma vez que diferentes pesquisadores podem aplicar metodologias com pequenas diferenças que geram resultados divergentes.

Diante dessas limitações, este trabalho propõe o desenvolvimento do DoseCV, um *software* que visa automatizar e facilitar a conversão dos resultados obtidos nas simulações dos MRCPs da Publicação 145 da ICRP processados através do MCNP. O DoseCV possui como pressuposto realizar o processamento dos valores de simulações, obtendo o resultado de valores de doses absolutas, coeficientes de conversão de dose ou coeficiente de dose, em diferentes granularidades. Vale ressaltar ainda que o DoseCV, com pequenas modificações, pode ser adaptado para ser utilizado em diferentes códigos baseados no algoritmo de Monte Carlo.

Importante salientar que pode surgir como contraponto à proposta do DoseCV, impulsionado pela modernidade do tema, o uso de IA (Inteligência Artificial) generativa para processar resultados de simulações. Todavia, esta proposta também apresenta desafios, já que embora as IAs sejam capazes de automatizar tarefas complexas, estão sujeitas a erros devido ao treinamento fornecido. Um dos principais problemas é o fenômeno denominado “alucinações”, onde os modelos geram informações incorretas. Isso pode ocorrer por diferentes motivos, como o sobreajuste, viés/imprecisão de dados de treinamento e até mesmo a alta complexidade do modelo (IBM, 2025).

2 OBJETIVOS

Desenvolver o DoseCV, um *software* capaz de automatizar a conversão e o processamento de dados dosimétricos provenientes de simulações com MCNP realizadas com os objetos simuladores (MRCs) da Publicação 145 da ICRP (ICRP, 2020). O programa procura minimizar erros humanos, padronizar a análise dos resultados e aumentar a eficiência do processamento, facilitando sua aplicação na pesquisa científica e na prática clínica da física médica e áreas correlatas.

2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Implementar um método de captura e pré processamento dos arquivos de entrada e saída das simulações do MCNP (respectivamente, *tally* e *mctal*) com os objetos simuladores da Publicação 145 da ICRP;
- Realizar cálculos de grandezas dosimétricas a partir dos valores de deposição de energia normalizados;
- Permitir, durante a implementação, a possibilidade para o usuário de diferenciar os cálculos entre: Coeficiente de Dose; Coeficiente de Conversão de Dose (equivalente e efetiva) e Dose (equivalente e efetiva);
- Criar uma GUI (Interface Gráfica do Usuário) intuitiva com instruções, que permite usuários com qualquer nível de conhecimento de programação a utilizar o programa;
- Transformar o código desenvolvido em um programa executável em sistema operacional *Windows*;
- Documentar e versionar o projeto, garantindo a transparência da estrutura, funcionalidade e atualizações para os pesquisadores que o utilizarão.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 PRINCÍPIOS DE DOSIMETRIA DE RADIAÇÃO

A dosimetria da radiação é essencial na proteção radiológica, sendo uma disciplina dedicada a quantificar a exposição da radiação ionizante nos meios (ICRP, 2010). Seu objetivo é fornecer estimativas precisas de dose para que os riscos associados à exposição possam ser gerenciados e minimizados, seguindo os princípios da sigla ALARA (*As Low As Reasonably Achievable*), que significa “Tão baixo quanto razoavelmente exequível” (ICRP, 2007).

As grandezas dosimétricas utilizadas neste trabalho foram:

- **Fluência:** A Fluência é simbolizada por Φ , “[...] sendo o quociente de dN por da , em que dN é o número de partículas incidentes em uma esfera de área de seção transversal da ” (ICRP, 2010, p. 23). Pode ser obtida pela Equação (1).

$$\Phi = \frac{dN}{da} \quad (1)$$

- **Kerma:** Kerma é definido como:

[...] quantidade para ionizar partículas não carregadas, definida pelo quociente de dE_{tr} por dm , onde dE_{tr} é a soma média das energias cinéticas iniciais de todas as partículas carregadas liberadas em uma massa dm de um material pelas partículas não carregadas incidentes em dm (ICRP, 2010, p. 24).

A Equação (2) representa o Kerma.

$$K = \frac{dE_{tr}}{dm} \quad (2)$$

- **Produto Kerma-área (PKA):** também conhecida como KAP (*Kerma Area Product*), o PKA (Equação (3)) é dado pela integral do produto entre o Kerma no ar (K) e a área do feixe de radiação (A). É utilizado principalmente em radiologia diagnóstica para estimar a exposição do paciente. Sua unidade é $\text{Gy} \cdot \text{m}^2$ (TERINI *et al.*, 2013).

$$PKA = \int K_A(a) dA \quad (3)$$

- **Dose Absorvida:** Representada pela Equação (4), a Dose Absorvida é definida como D , “[...] onde $d\bar{\epsilon}$ é a energia média depositada pela radiação em um volume elementar de matéria de massa dm . A unidade no sistema internacional é o joule por quilograma ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$), que recebe a denominação especial gray (Gy)” (CNEN, 2024, p. 4).

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm} \quad (4)$$

- **Dose Absorvida Média em um Tecido ou Órgão (D_T):** Demonstrada através da Equação (5), “[...] onde m_T é a massa do órgão ou tecido e D é a dose absorvida no elemento de massa dm . A unidade de dose média absorvida é joule por quilograma (J/kg), e seu nome especial é gray (Gy)” (ICRP, 2010, p. 24).

$$D_T = \frac{1}{m_T} \int_{m_T} D dm \quad (5)$$

- **Dose Equivalente:** A dose equivalente (Equação (6)) H_T é definida como:

[...] a dose absorvida média no volume de um órgão ou tecido T específico, devido à radiação R incidente no corpo ou emitida por radionuclídeos incorporados e w_R é o fator de peso para a radiação R. A unidade no sistema internacional é o joule por quilograma (J.kg⁻¹), que recebe a denominação especial sievert (Sv) (CNEN, 2024, p. 4).

$$H_T = \sum_R w_R D_{T,R} \quad (6)$$

- **Dose Efetiva:** Segundo a Equação (7):

[...] E é a dose equivalente no tecido ou órgão T e w_T é o fator de peso do respectivo órgão ou tecido. A unidade no sistema internacional é o joule por quilograma (J.kg⁻¹), que recebe a denominação especial sievert (Sv)” (CNEN, 2024, p. 4).

$$E = \sum_T w_T H_T \quad (7)$$

- **Doses médias absorvidas no esqueleto:** para a realização das estimativas da dose absorvida pelos tecidos-alvo esqueléticos (medula ativa e endóstio) de forma precisa, a ICRP redefiniu os alvos dos efeitos estocásticos de interesse. As células-tronco hematopoiéticas estão associadas ao risco de leucemia, enquanto as células osteoprogenitoras, localizadas dentro de 50 μm a partir da superfície óssea (denotado por TM_{50}), estão relacionadas ao risco de câncer ósseo (ICRP, 2010). A separação entre ambas é essencial porque essas regiões possuem diferentes localizações anatômicas, composições e respostas à radiação. A dose média absorvida pela medula vermelha e pelo TM_{50} são, respectivamente, determinadas pelas equações (8) e (9) (ICRP, 2010):

$$D_{\text{skel}}(\text{AM}) = \sum_x \frac{m(\text{AM}, x)}{m(\text{AM})} D(\text{SP}, x) \quad (8)$$

$$D_{\text{skel}}(\text{TM}_{50}) = \sum_x \frac{m(\text{TM}_{50}, x)}{m(\text{TM}_{50})} D(\text{SP}, x) + \sum_x \frac{m(\text{TM}_{50}, x)}{m(\text{TM}_{50})} D(\text{MM}, x) \quad (9)$$

onde:

- $D(\text{SP}, x)$: dose absorvida na região esponjosa do tecido ósseo x ;
- $D(\text{MM}, x)$: dose absorvida na região medular do tecido ósseo x ;
- $m(\text{AM}, x)$: massas da medula ativa no sítio x ;
- $m(\text{TM}_{50}, x)$: massas do endóstio no sítio x ;
- $m(\text{AM})$ e $m(\text{TM}_{50})$: massas totais dessas regiões ao longo de todo o esqueleto.

Os Coeficientes de Dose (DC, do inglês *Dose Coefficient*) e os Coeficientes de Conversão de Dose (CC, do inglês *Conversion Coefficient*) são grandezas fundamentais no que tange às simulações computacionais em dosimetria, elas partem do princípio do uso de um Fator de Conversão (CF, do inglês *Conversion Factor*) que visa transpor os dados de simulação para dados reais. Além disto, os próprios cálculos de Dose convencionais (equivalente e efetiva) precisam ser modificados no contexto das simulações. Estas grandezas podem ser definidas da seguinte forma:

- **Coeficiente de Dose (DC)**: O coeficiente de dose DC , expresso em $\text{pGy} \cdot \text{cm}^2$, é uma métrica usada para representar a dose absorvida por unidade de área irradiada em um determinado tecido ou órgão T . Seu cálculo pode ser visualizado na Equação (10), onde D_T é o valor de dose absorvida e A (cm^2) a área do feixe (GRIFFIN *et al.*, 2019; ICRP, 2010; JÚNIOR, 2025).

$$DC = D_T \times A \text{ (cm}^2\text{)} \cdot 1.602 \times 10^{-13} \left(\frac{\text{J}}{\text{MeV}} \right) \cdot 10^3 \left(\frac{\text{g}}{\text{kg}} \right) \cdot 10^{12} \left(\frac{\text{pGy}}{\text{Gy}} \right) \quad (10)$$

- **Fator de Conversão (CF)**: Segundo a Equação (11), o fator de conversão CF é definido como a razão entre o kerma no ar medido experimentalmente (K_{air}) e o kerma simulado por partícula (K_{airMC}). Essa razão permite converter os resultados obtidos por simulação Monte Carlo para grandezas reais (SOARES *et al.*, 2019; JÚNIOR, 2025).

$$CF = \frac{K_{\text{air}}}{K_{\text{airMC}}} \quad (11)$$

- **Coeficiente de Conversão de Dose Equivalente $CC[H_T]$** : Segundo a Equação (12), o $CC[H_T]$ representa a relação entre a dose equivalente H_T e o kerma no ar obtido por simulação de Monte Carlo (K_{airMC}), onde w_R é o fator de ponderação da radiação (ICRP, 2010; JÚNIOR, 2025).

$$CC[H_T] = D_T \cdot 1.602 \times 10^{-7} \cdot \left(\frac{1}{K_{\text{airMC}}} \right) w_R \quad (12)$$

- **Coefficiente de Conversão de Dose Efetiva $CC[E]$:** O $CC[E]$ é obtido como a média ponderada do $CC[H_T]$, considerando os fatores de ponderação tecidual w_T atribuídos a cada órgão ou tecido (Equação (13)) (ICRP, 2010; JÚNIOR, 2025).

$$CC[E] = CC[H_T] \cdot w_T \quad (13)$$

- **Dose Equivalente H_T :** Apesar de já ser demonstrada na Equação (6), a dose equivalente H_T em um tecido ou órgão T precisa ser corrigida pela razão entre o kerma no ar medido experimentalmente (K_{air}) e o kerma simulado via Monte Carlo (K_{airMC}), conforme definido na Equação (14) (ICRP, 2010; JÚNIOR, 2025).

$$H_T \text{ (mSv)} = D_T \cdot 1,602 \times 10^{-7} \cdot \left(\frac{K_{\text{air}}}{K_{\text{airMC}}} \right) w_R \quad (14)$$

- **Dose Efetiva E :** Analogamente à equação Equação (14), apesar de existir uma definição base para dose efetiva E (dado pela Equação (7)), ela precisa ser modificada para considerar o fator de conversão CF. Ela é demonstrada na Equação (15) (ICRP, 2010; JÚNIOR, 2025).

$$E \text{ (mSv)} = \sum_T H_T \cdot w_T \quad (15)$$

É importante salientar que este H_T da Equação (15) é o valor dado pela Equação (14).

3.2 BASES DE DADOS DE MATERIAIS

Para uma otimização nos resultados, é possível utilizar uma base de dados de materiais contendo informações sobre as frações de massa relativas de cada estrutura anatômica, além das ponderações dos tecidos (w_T) para cada uma delas. Essas informações são necessárias para garantir que as considerações de deposição de energia em cada estrutura sejam uma representação da realidade física. Na ausência dessa base, órgãos/tecidos compostos por múltiplas células receberiam uma média simples das contribuições de cada energia, onde para os casos em que um determinado órgão simulado possuísse mais de uma célula e qualquer uma das massas fosse significativamente maior, haveria um cálculo incorreto das doses devido às desproporcionalidades, sendo atribuída a uma estrutura com massa menor um mesmo peso nos cálculos subsequentes.

A base de dados utilizada no DoseCV possui um *layout* apresentado no trabalho descrito por Júnior (2025). Sua estrutura é composta por dois arquivos em formato Excel: um contendo dados de “órgãos, tecidos e outros” e outro referente aos “tecidos esqueléticos”. O cabeçalho do modelo de dados utilizado em cada planilha pode ser visualizado, respectivamente, nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 – Cabeçalho da tabela: Órgãos, tecidos e outros

Tissue/organ	Tally Name	Tally	Male mass (g)	Female mass (g)	w_T	Type
--------------	------------	-------	---------------	-----------------	-------	------

Fonte: Adaptado de (JÚNIOR, 2025).

Tabela 2 – Cabeçalho da tabela: Tecidos Esqueléticos

Bonesite	Bonesite Detail	Tally	Male - Active marrow mass (g)	Male - Endosteum mass (g)	Female - Active marrow mass (g)	Female - Endosteum mass (g)	w_T
----------	-----------------	-------	-------------------------------	---------------------------	---------------------------------	-----------------------------	-------

Fonte: Adaptado de (JÚNIOR, 2025).

3.3 PYTHON E BIBLIOTECAS UTILIZADAS

A linguagem Python foi criada no final dos anos 1980 por Guido van Rossum no Centrum Wiskunde & Informatica (CWI) nos Países Baixos. Van Rossum buscava uma linguagem que superasse as limitações das linguagens existentes até então. A primeira versão do Python, 0.9.0, foi lançada em 1991 (PAIVA *et al.*, 2020).

O Python é uma linguagem de propósito geral e de código aberto, o que permite o constante desenvolvimento de novas funcionalidades por parte da comunidade e a torna uma das mais utilizadas no mundo devido à sua flexibilidade. Através disto, é possível o compartilhamento de soluções gerais (ou até mesmo específicas) por parte da comunidade por meio da disponibilização das chamadas “bibliotecas”, que são um conjunto de funções e objetos com determinados propósitos. De forma nativa, o Python já oferece ao usuário uma vasta gama de módulos instalados e validados, porém, é possível realizar a instalação de novas bibliotecas e acessar seus códigos-fonte (PYTHON, 2025).

Dessa forma, a linguagem se destaca por sua aplicabilidade em tarefas relacionadas à análise e ao tratamento de dados, como as desenvolvidas neste trabalho, devido à presença de bibliotecas robustas e bem documentadas. Sua sintaxe clara e de fácil interpretação, aliada à ótima velocidade de execução, torna o Python uma ferramenta extremamente eficiente para o desenvolvimento de soluções científicas.

No presente trabalho, foram utilizadas 5 bibliotecas externas, cada uma com o objetivo de sanar problemáticas específicas da proposta do DoseCV:

1. **re**: Manipulação de expressões regulares para busca e substituição em strings;
2. **Pandas**: Biblioteca para manipulação e análise de dados estruturados;
3. **PySimpleGUI**: Ferramenta para criar interfaces gráficas do usuário (GUIs);

4. **Webbrowser**: Abre URLs em navegadores diretamente a partir de scripts em Python;
5. **PyInstaller**: Empacota scripts Python em pacotes executáveis independentes para distribuição.

A biblioteca **re** fornece uma interface para trabalhar com expressões regulares, permitindo a busca, correspondência e manipulação de padrões textuais. Ela é amplamente utilizada em projetos para tarefas como validação, extração e processamento de textos (CHAPMAN; STOLEE, 2016; RE, 2025). Os arquivos de saída do MCNP possuem informações que tornam o uso desta biblioteca uma ótima alternativa, dado que podem ser utilizados os padrões para a captura das informações através do uso de expressões regulares.

A biblioteca **Pandas**, desenvolvida em 2008, é utilizada de forma ampla na disciplina de análise de dados, tendo uma alta performance ao lidar com grande volumetria de dados e é utilizada para diversos fins, como: visualização de dados; *machine learning*; estatística; análise de dados; cultura guiada por dados; visão computacional; processamento de linguagem natural etc. Uma das formas mais comuns de armazenamento de dados na biblioteca é através da utilização do chamado “DataFrame” (DF), que é o nome dado a uma estrutura de dados bidimensional, semelhante a uma tabela, que organiza dados em linhas/colunas, permitindo manipulação e análise de forma eficiente (WEBBROWSER, 2025; PANDAS, 2025). Desta forma, ela se torna uma ótima alternativa para manipular e aplicar operações dentro do contexto deste estudo.

PySimpleGUI é uma biblioteca projetada para simplificar o desenvolvimento de uma GUI (Interface Gráfica do Usuário). Ela centraliza recursos de outras bibliotecas comuns como **Tkinter**, **Qt** (**PySide2** e **PyQt**), **WxPython** e **Remi** para a criação de GUIs. Isso permite que os desenvolvedores criem GUIs multiplataforma com um único código-fonte, reduzindo a complexidade associada ao uso direto dessas bibliotecas subjacentes (PYSIMPLEGUI, 2025). A **PySimpleGUI** é uma ferramenta essencial para a criação do DoseCV, possibilitando a criação de sua interface.

A biblioteca **webbrowser** em Python é um módulo que fornece uma interface de alto nível para controlar navegadores web. Ela permite abrir URLs, navegar para páginas específicas e realizar ações básicas de automação em navegadores diretamente a partir de *scripts* em linguagem Python (WEBBROWSER, 2025). No DoseCV ela foi utilizada para condução dos usuários ao repositório digital da documentação.

PyInstaller é uma biblioteca que possui como função realizar o empacotamento de *scripts* Python em aplicativos executáveis independentes, permitindo que sejam executados em sistemas que não possuem Python instalado. Ele possui um fluxo onde analisa o código, identifica todas as dependências (bibliotecas e módulos) e as incorpora junto com o interpretador Python em um único executável ou pasta distribuível (PYINSTALLER, 2025).

4 DESENVOLVIMENTO

4.1 ESTRUTURA E ARQUITETURA DO CÓDIGO

O desenvolvimento do DoseCV segue uma arquitetura de código onde há a declaração de funções segregadas por módulos e execução final em uma classe, organizado de forma a garantir a maior eficiência possível em todas as etapas de execução do código e também para futuras manutenções de código.

Para isto, foi incluída uma sequência na estrutura do código onde ele primeiramente realiza a captura das informações de saída das simulações do MCNP, realizando a normalização dessas informações através de bibliotecas especializadas em manipulações de dados e, em seguida, aplica as sequências de manipulações matemáticas a fim de resolver as equações a partir das intenções do usuário. Se for solicitado o cálculo, por exemplo, do CC, o código acionará uma determinada função. Porém, se o parâmetro de código passado para a realização dos cálculos for o de Dose Equivalente e Efetiva, o acionamento de funções será diferente.

A seguir, são descritos os principais componentes da arquitetura:

1. Módulo de Leitura e Pré Processamento dos dados de Arquivos: Responsável por interpretar o arquivos de entrada e saída das simulações (respectivamente, *tally* e *mctal*), das bases de materiais e realiza a normalização das informações;
2. Módulo de Processamento de Dados: Implementa os cálculos necessários para a obtenção das grandezas dosimétricas, incluindo coeficientes de dose, coeficiente de conversão de dose equivalente e efetiva, a partir dos dados da etapa anterior;
3. Módulo de Exportação de Dados: Permite salvar os resultados processados em formatos como CSV e Excel, possibilitando a análise mais detalhada;
4. Módulo de Interface Gráfica (GUI): Desenvolvido com PySimpleGUI, este módulo fornece uma interface intuitiva para facilitar a interação do usuário com o *software*, permitindo a seleção de arquivos, acionamento da documentação, a configuração dos parâmetros de conversão e a visualização dos resultados.

4.2 LEITURA DOS ARQUIVOS E PRÉ PROCESSAMENTO DE DADOS

Ao realizar uma simulação no MCNP, o usuário obterá arquivos de saída que são utilizados para fazer a captação das informações de deposição de energia, sendo o principal o *mctal*.

O DoseCV requer também as informações de materiais apresentadas na Seção 3.2. Uma tabela que não contém células além das que compõem os MRCPs, está disponibilizada aos usuários e pode ser acessada através do link [GitHub - Material Database](#), ela pode ser modificada com a adição de novas informações a depender das necessidades do usuário,

porém seu cabeçalho e tipo de dado de cada coluna devem permanecer exatamente como fornecidos.

A utilização do GitHub como plataforma de hospedagem do projeto DoseCV visa não apenas a disponibilização do software, de seus arquivos complementares e documentação, mas também o incentivo à ciência aberta e à reprodutibilidade dos resultados. Para facilitar a comunicação com os usuários e interessados no DoseCV, foi criado um endereço de e-mail do projeto: dosecvhelp@gmail.com.

4.2.1 Compreensão da estrutura dos arquivos *tally* e *mctal*

O arquivo *tally* representa a correspondência de números de um determinado componente simulado (designado como número da célula) e o nome da estrutura, conforme formato gerado pelo código POLY2TET (HAN, 2025). Por padrão, a primeira linha sempre será um cabeçalho de descrição do arquivo (não relevante para análise de dados). Para cada uma das próximas linhas, os arquivos sempre possuem um determinado prefixo (irrelevante para o DoseCV) e o número da célula que aparecerá dentro dos parênteses (infixo). Por fim, o sufixo do arquivo sempre terá um cifrão seguido de uma nomenclatura da célula simulada que o usuário passou ao *software* antes de realizar a simulação. A quebra de linhas do arquivo é feita pelo sistema CR e LF (é uma instrução que finaliza uma linha, essa informação será importante na subseção de leitura e pré-processamento dos dados).

A Figura 1 representa um exemplo de arquivo com a extensão *tally* gerado pelo POLY2TET. É possível verificar que a linha 1 possui a descrição do arquivo (“*C TALLIES FOR EACH ORGANS/TISSUE*”). Caso o usuário não tenha um arquivo semelhante, basta criar um arquivo que siga as padronizações descritas acima.

Ao ler a linha 2, o usuário encontrará o valor “+f16 (1) \$exemplo_estrutura_1”, que representa a célula número 1 desta simulação fictícia do *tally* tipo +F6, onde o nome dela é “exemplo_estrutura_1”. Este padrão se repetirá para todas as outras estruturas que serão representadas nas linhas seguintes.

Figura 1 – Exemplo do arquivo tally

```

1 C TALLIES FOR EACH ORGAN/TISSUECRLF
2 +f16      ( 1      ) $exemplo_estrutura_1CRLF
3 +f26      ( 2      ) $exemplo_estrutura_2CRLF
4 +f36      ( 3      ) $exemplo_estrutura_3CRLF
5 +f46      ( 4      ) $exemplo_estrutura_4CRLF
6 +f56      ( 5      ) $exemplo_estrutura_5CRLF
7 +f66      ( 6      ) $exemplo_estrutura_6CRLF
8 +f86      ( 7      ) $exemplo_estrutura_7CRLF

```

Fonte: O autor (2025).

O arquivo *mctal* possui uma estrutura peculiar ao ser aberta em um editor de textos. Toda a quebra de linhas deste arquivo é feita pelo sistema Carriage Return (CR) e Line Feed (LF). Cada linha no início do arquivo fornece uma informação específica, porém, a partir de um certo ponto há um padrão de repetições. A Figura 2 exemplifica um arquivo *mctal* com apenas um valor de resultado de um *tally* simulado (o *tally* número 1), onde é possível observar o formato dos dados.

Cada simulação poderá ter divergências nas identificações a partir da linha 3, o que deve ser levado em conta com extremo cuidado na etapa de leitura do arquivo *mctal*. Um exemplo é a linha 4, que caso a simulação tenha 24 células no *tally*, todas as linhas subjacentes serão deslocadas 3 linhas abaixo (para cada 8 células, há o deslocamento de uma linha). Outro exemplo é o padrão de repetições a partir da linha 6 do exemplo da Figura 2, onde para cada célula haverá um número diferente de linhas, já que cada simulação pode ter um número de partículas a serem simuladas e quantidade de estruturas/órgãos/células diferentes. Não há um limite de linhas para este arquivo, o que deve ser levado em conta na leitura.

A partir destas descrições, é possível visualizar que os arquivos de saída do MCNP utilizados para o processamento dos valores dosimétricos, principalmente o *mctal*, não possuem um padrão simples e, para a criação do processo de leitura para o pré-processamento da informação (antes da realização de qualquer cálculo), é necessário levar em conta a possibilidade de diferentes cenários dos usuários, sejam eles com inúmeros valores de células durante uma simulação ou até mesmo o versionamento do MCNP utilizado para a geração dos valores (KULESZA *et al.*, 2022).

4.2.3 Cálculos

Após o pré-processamento de dados, é aplicada toda a sequência de cálculos para a geração dos valores dosimétricos. O código responsável por esta etapa possui aproximadamente 450 linhas, portanto não será realizada a descrição detalhada do mesmo, e sim apenas pontuar os principais tópicos/funções abordados(as).

Esse fluxo pode seguir dois caminhos distintos: (i) cálculo do DC (Coeficiente de Dose) ou (ii) cálculo do CC (Coeficiente de Conversão) Equivalente/Efetiva e da Dose Equivalente/Efetiva. Toda a sequência de operações realizadas pelo DoseCV será descrita a seguir e pode ser acompanhada pela Figura 3.

Independentemente da escolha do usuário, há um conjunto inicial de etapas comuns:

- **Leitura dos Arquivos de Entrada do DoseCV:** O código pode ler o arquivo *tally*, que contém informações sobre IDs (códigos identificadores) e células, enquanto o arquivo *mctal* armazena dados simulados e seus respectivos erros. Além disto, lê também as bases de dados que contêm as informações das estruturas dos órgãos/tecidos/outros/tecidos esqueléticos;
- **Normalização dos nomes das estruturas:** Ajuste dos identificadores das estruturas para garantir consistência na manipulação dos dados posteriores;
- **Junção dos Dados (*Join*):** Os dados dos arquivos *mctal* e *tally* são combinados com base no ID das estruturas. Essa junção é armazenada em uma variável auxiliar. Também é realizada a fusão dos dados com o banco de materiais, utilizando informações sobre o gênero (informado na execução da função);
- **Normalização dos Valores de Deposição de Energia:** Aplicação de um ajuste para estruturas de malha que possuem múltiplos órgãos associados, onde nestes casos, é levado em conta a massa total (em kg) do órgão e a representação de cada estrutura dentro deste órgão. Essa etapa também é aplicada com erros das simulações.

Após isto, o processo pode seguir por dois caminhos distintos, dependendo do cálculo desejado.

Fluxo 1: Cálculo do DC (Coeficiente de Dose) Este caminho foca na determinação do DC (Coeficiente de Dose) e valores relacionados aos tecidos esqueléticos:

- **Cálculo de D_{TM50} e D_{AM} :** A partir das equações (9) e (8), realiza o cálculo exclusivo para os valores de tecidos esqueléticos, onde é aplicada as equações correspondentes para os tecidos esqueléticos;
- **Definição da constante de conversão de energia para DC** (parte da Equação (10));
- **Cálculo da Energia Depositada:** Com a Equação (10), realiza o cálculo de DC utilizando fórmulas diferentes para os órgãos/tecidos/remanescentes e para os tecidos esqueléticos;

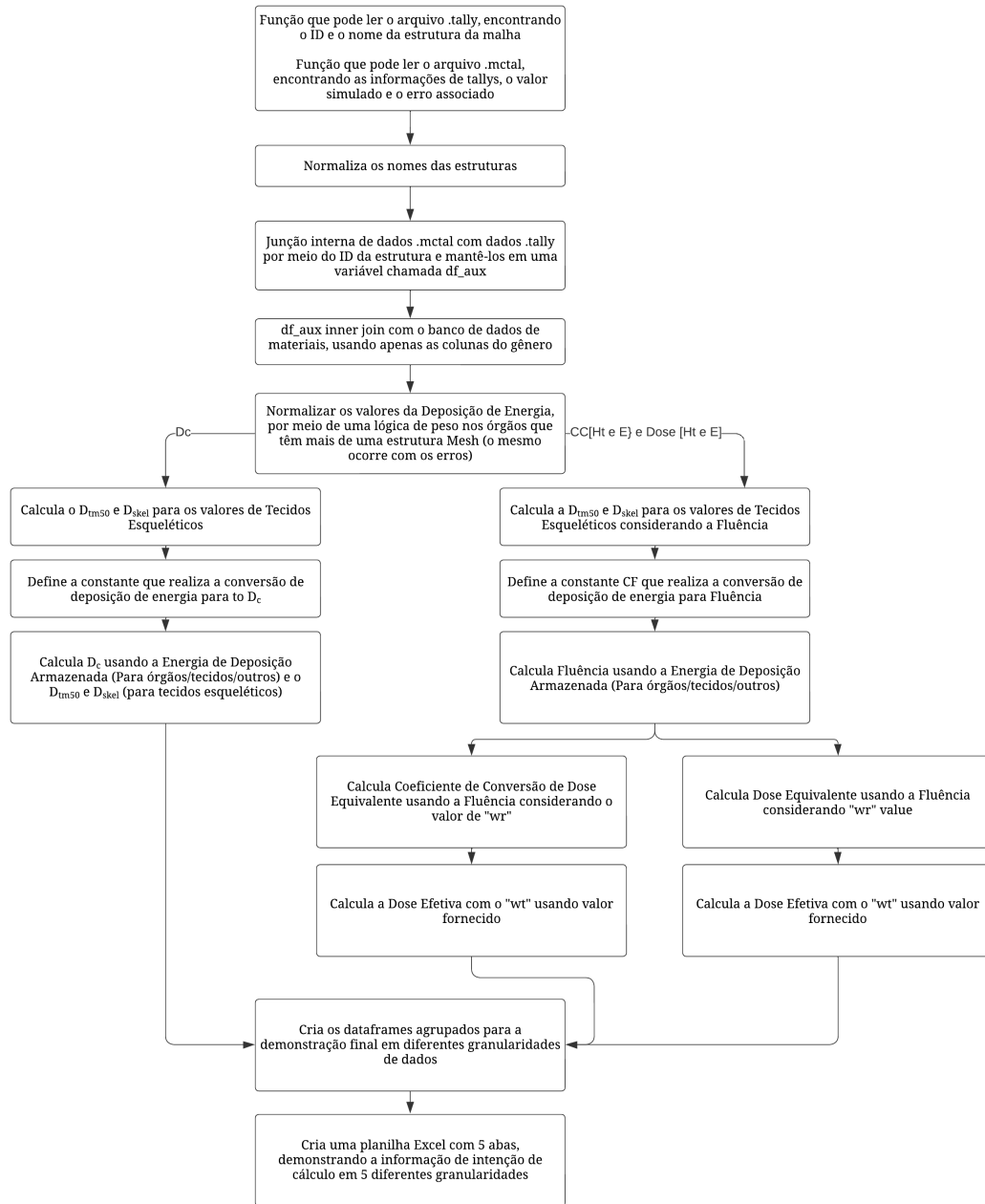
Fluxo 2: Cálculo do CC (Coeficiente de Conversão) e Dose Equivalente/Efetiva. Este fluxo determina estas grandezas, seguindo as etapas:

- Cálculo da Fluência: Com a Equação (1), faz os cálculos entre os órgãos/tecidos/outros e tecidos esqueléticos;
- Definição da constante de conversão de energia para a Fluência, usando o fator de conversão proposto na Equação (11);
- Determinação da Fluência para os órgãos/tecidos/remanescentes e tecidos esqueléticos (dados normalizados);
- Cálculo do Coeficiente de Conversão de Dose Equivalente/Efetiva: caso seja atribuída na variável de controle da função o cálculo de CC (equivalente e efetiva), a partir das equações (12) e (13) utiliza o valor de w_R e o w_T capturado na planilha de materiais para fazer os cálculos de, respectivamente, CC[HT] e CC[E];
- Cálculo da Dose Efetiva/Equivalente: caso seja atribuída na variável de controle da função o cálculo de Dose (equivalente e efetiva) com os conhecimentos acerca das equações (14) e (15) e com base no fatores w_R e w_T , realiza o cálculos dos valores dosimétricas Dose Equivalente e Efetiva, respectivamente.

Após estes dois fluxos bifurcados, independentemente do caminho seguido, os resultados são organizados e preparados para visualização:

- Criação de DFs Agrupados: após os cálculos, realiza-se o agrupamento das informações em diferentes DFs, criados de forma específica para a demonstração dos dados;
- Planilha Final: O resultado final é exibido ao usuário em um formato fixo, mas também é possível ser exportado para um arquivo Excel contendo até 6 abas, cada uma demonstrando diferentes níveis de granularidade das informações.

Figura 3 – Fluxograma de cálculos aplicados no DoseCV



Fonte: O autor (2025).

4.3 INTERFACE GRÁFICA (GUI)

No desenvolvimento da interface gráfica do *software*, foi utilizada a biblioteca PySimpleGUI. A implementação seguiu uma abordagem modular, organizando a interface em 5 diferentes possíveis janelas para facilitar a inserção de arquivos e parâmetros necessários para os cálculos.

A estrutura principal da interface conta com uma primeira janela (Janela 1) de-

dicada à seleção dos arquivos de entrada, os arquivos .mctal, .tally e os 2 bancos de dados de materiais (suportando formatos CSV e Excel). Para garantir que os usuários não prossigam sem preencher os campos obrigatórios, foi realizada a implementação de uma verificação que exibe um status indicando se os arquivos foram corretamente carregados. Essa funcionalidade é implementada por meio da função `check_fill_status()`, que retorna “Ok” quando um campo está preenchido e “X” caso contrário, indicando quais os arquivos faltantes. O usuário também pode passar o cursor sobre qualquer campo e será exibida uma dica de ferramenta indicando qual informação deve ser preenchida naquele lugar (através da função `tooltip`).

Além disso, foram incluídas opções para acesso direto à documentação e informações sobre o *software*, através da função `show_about_popup()` (Janela 2). A funcionalidade de documentação é implementada pela função `open_documentation_window()` (Janela 3), que exibe links para os arquivos de documentação e, no clique do usuário, abrirá o link em seu navegador padrão.

O fluxo de navegação do usuário é controlado por meio de eventos, onde a primeira janela (`window1`) aguarda a seleção dos arquivos e a confirmação do usuário (através do botão `Ok`). Caso os arquivos obrigatórios não sejam informados, o aviso em formato pop-up supracitado impede a continuidade. Ao prosseguir corretamente, a interface exibe uma segunda janela (`window2`), onde o usuário deve inserir os parâmetros específicos do cálculo, que diferem dependendo da seleção entre cálculo de “DC” ou “CC[HT], CC[E], E e HT” (respectivamente, Janelas 4 e 5). No caso de “DC” é solicitado ao usuário a área da seção transversal do feixe. No segundo caso, são solicitadas as informações sobre o ID da célula que representa o PKA experimental (dentro do *software* PKA é representado como KAP (*Kerma Area Product*), sua nomenclatura em inglês) e sua área (em cm²), o PKA aferido experimentalmente no ar e o tipo de partícula.

Por fim, após a validação dos dados, os arquivos são carregados e passam pelos fluxos descritos nas subseções 4.2.2 e 4.2.3. O desenvolvimento da interface foi pensado para garantir que a experiência do usuário seja fluida e simples.

4.4 COMPILAÇÃO DO EXECUTÁVEL

Para compilar o código em um executável, foi utilizada a biblioteca **PyInstaller**, assegurando que o *software* pudesse ser executado em qualquer computador sem a necessidade de um interpretador Python instalado, desde que tenha um sistema operacional *Windows* (a partir da versão 10). Inicialmente, foi realizada a criação e ativação de um ambiente virtual através do terminal de comando (`CMD`), onde foram instaladas todas as bibliotecas necessárias para o funcionamento do programa. Em seguida, houve a navegação até a pasta onde o código-fonte final estava localizado e a execução do seguinte comando do PyInstaller:

```
pyinstaller -onefile -noconsole -icon=DoseCV.png DoseCV.py
```

O parâmetro `-onefile` garante que o executável seja gerado como um único arquivo, o `-noconsole` que impede a abertura do terminal de comandos do *Windows* ao rodar a aplicação. Além disso, foi realizada a criação de um ícone personalizado para o executável, atribuído através do comando `-icon=DoseCV.png`.

4.5 DOCUMENTAÇÃO

Visando a continuidade do projeto e autonomia dos usuários, foi desenvolvida uma documentação para o DoseCV com o objetivo de fornecer instruções detalhadas sobre o *software*, abrangendo suas funcionalidades e orientando o usuário - de forma simplificada e objetiva - quais as operações realizadas pelo programa. O material conta com um total de 12 páginas.

Para atender a um público amplo, a documentação foi disponibilizada através de um repositório digital em duas linguagens: Português (pt-BR) e Inglês (en-US). Ambas as versões garantem que usuários de diferentes regiões possam compreender as instruções e utilizar o DoseCV de maneira correta.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 DOSECV

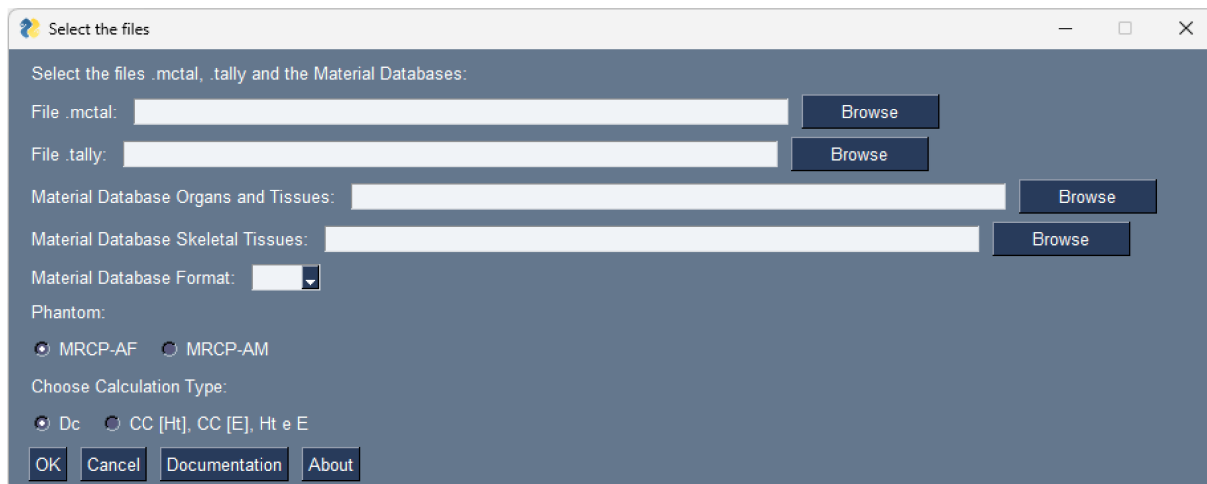
O *software* resultante da pesquisa possui, como supracitado, 5 possíveis telas (Figuras 4, 5, 6, 7 e 8), demonstradas da seguinte forma: tela principal (tela principal para os usuários); tela de “Sobre” (informações gerais do *software*); documentação (links para documentações em português e inglês); seleção de cálculo “DC” (aba que solicita a área da seção transversal do feixe); seleção de cálculo CC ou Dose Efetiva e Equivalente (solicitação de informações do MCNP e tipo de partícula). O DoseCV foi disponibilizado através do GitHub no seguinte link [GitHub - DoseCV](#).

O *software* foi disponibilizado sob a Licença Pública Geral Affero GNU, versão 3 (AGPLv3), a qual autoriza sua distribuição de forma gratuita, desde que não seja utilizado para fins comerciais.

A tela inicial do *software*, demonstrada na Figura 4, possui os seguintes campos:

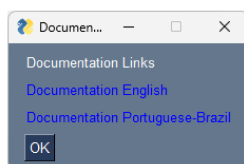
- ***File .mctal***: solicita a seleção do arquivo mctal;
- ***File .tally***: solicita a seleção do arquivo tally;
- ***Material Database Organs and Tissues***: solicita a seleção do arquivo de base de materiais de Tecidos e Órgãos;
- ***Material Skeletal Tissues***: solicita a seleção do arquivo de base de materiais de Tecidos Esqueléticos;
- ***Material Database Format***: seleção do formato das duas bases de materiais entre “CSV” e “XLSX” (Excel);
- ***Phantom: seleção entre MRCP-AF*** (MRCP feminino adulto) e “MRCP-AM” (MRCP masculino adulto);
- ***Choose Calculation Type***: selecionar o tipo de cálculo entre “DC” e “CC[HT], CC[E] ou Ht e E”;
- Botão ***Documentation***: links que direcionam para a documentação em inglês e português (Figura 5);
- Botão ***About***: descrição geral do DoseCV e e-mail de contato (Figura 6).

Figura 4 – Tela principal do DoseCV



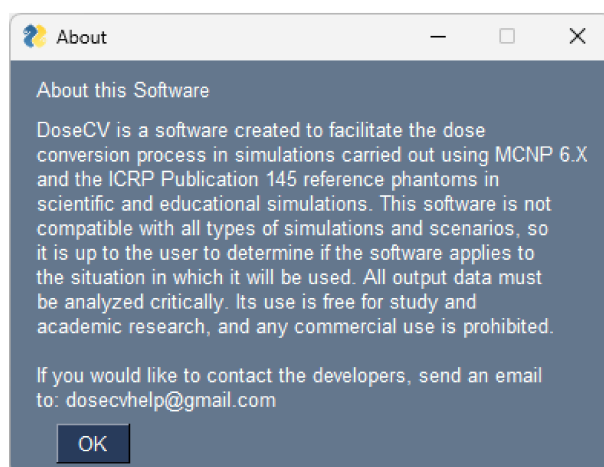
Fonte: O autor (2025).

Figura 5 – Tela DoseCV: Documentação



Fonte: O autor (2025).

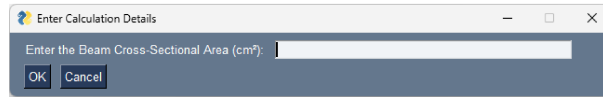
Figura 6 – Tela DoseCV: Sobre



Fonte: O autor (2025).

Ao avançar na opção do cálculo de DC, o usuário obterá a tela demonstrada pela Figura 7. O usuário deverá colocar o valor da área da seção transversal do feixe em centímetros quadrados.

Figura 7 – Tela DoseCV: Cálculo de DC

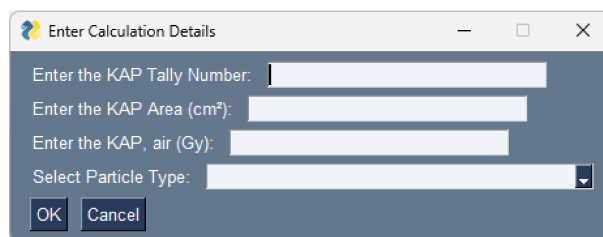


Fonte: O autor (2025).

Na última opção, ao selecionar o cálculo de “CC[HT], CC[E] ou Ht e E” (Figura 8), o usuário terá uma visualização da solicitação de 4 campos:

- **Enter the KAP Tally Number:** o usuário deverá colocar apenas o número do tally correspondente ao objeto de simulação do PKA;
- **Enter the KAP Area (cm^2):** inserção do valor, em cm^2 , da área do objeto de simulação PKA;
- **Enter the KAP, Air (Gy):** inserção do valor experimental do PKA. O usuário pode ou não preencher este campo, no caso de preenchimento será realizado o cálculo de Ht e E. Se o usuário não preencher, será disponibilizado o cálculo de CC[HT] e CC[E];
- **Select Particle Type:** seleção do tipo de partícula utilizada para a realização da simulação.

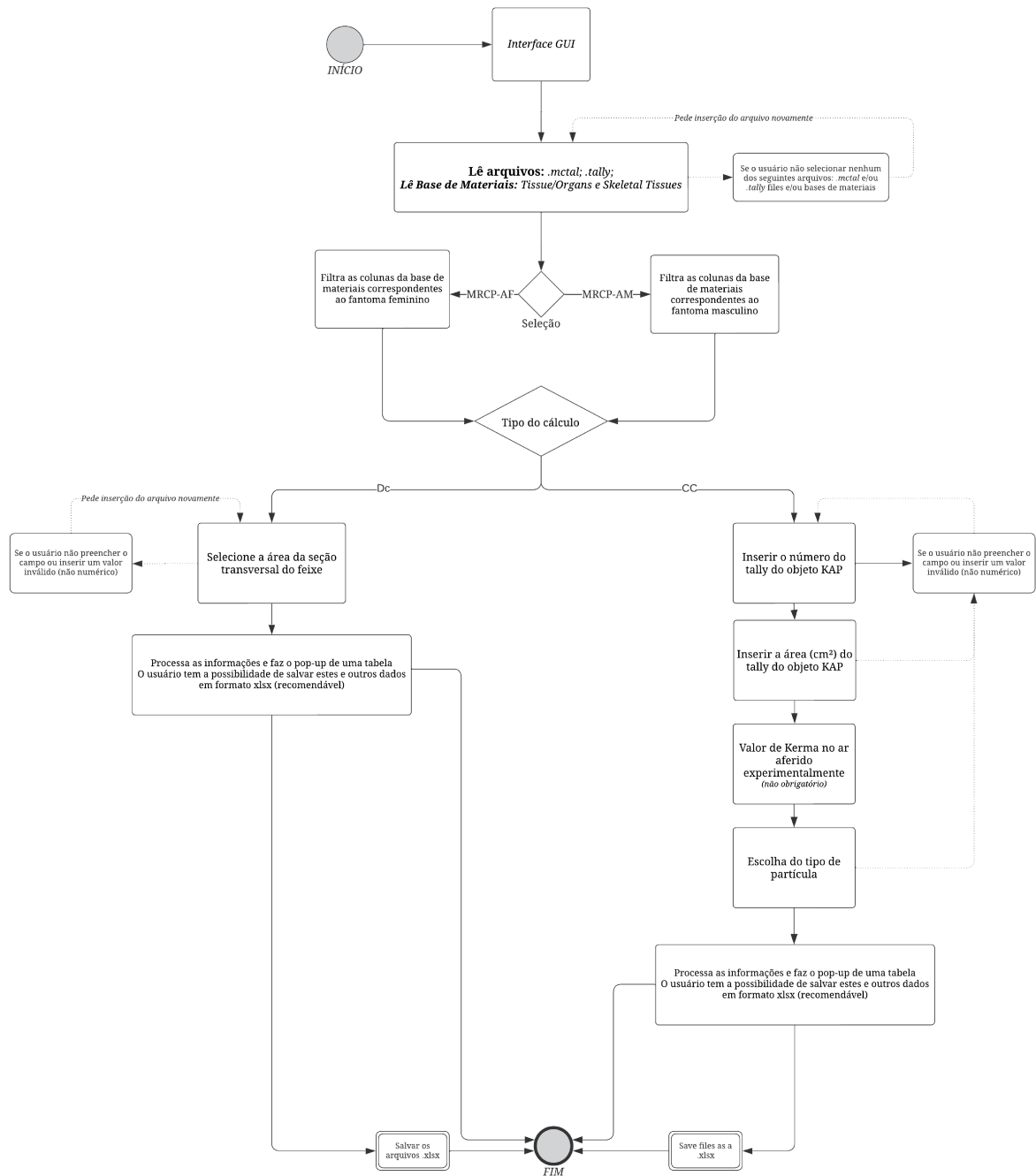
Figura 8 – Tela DoseCV: Cálculo de CC[HT], CC[E] ou Ht e E



Fonte: O autor (2025).

O fluxograma final do funcionamento do DoseCV, na visão do usuário, é exibido na Figura 9. Todos os caminhos possíveis supracitados que o usuário pode tomar dentro do *software* estão contemplados na imagem.

Figura 9 – Fluxograma do funcionamento do DoseCV: ponto de vista do usuário



Fonte: O autor (2025).

5.2 DOCUMENTAÇÃO

A documentação do DoseCV foi elaborada com informações detalhadas das interfaces, instruções de utilização, descrição dos arquivos de entrada e saída e todo o registro de alterações realizadas nos versionamentos. A documentação está disponível em duas versões, através do GitHub:

- Português: [GitHub - Documentação pt-BR](#);
- Inglês: [GitHub - Documentação en-US](#).

A versão em português também pode ser encontrada no Apêndice A.

5.3 VALIDAÇÃO DO DOSECV

A validação científica do *software* DoseCV foi realizada por meio de comparações com os DCs demonstrados na Publicação 116 da ICRP. A metodologia e os testes foram descritos na tese de doutorado de Júnior (2025), intitulada “Desenvolvimento e validação de um *software* para estudo de dosimetria numérica com os objetos simuladores da Publicação 145 da ICRP”, em que os objetos simuladores MRCP-AF e MRCP-AM foram submetidos a simulações no MCNP na versão 6.3, com os mesmos cenários descritos na publicação 116 (JÚNIOR, 2025; ICRP, 2010).

De acordo com os resultados descritos no trabalho de Júnior (2025), considerando quatro energias simuladas, o erro relativo entre os valores processados pelo DoseCV e os dados de referência foi inferior a 5% para 89% dos tecidos-alvo do MRCP-AF e 77% dos tecidos-alvo do MRCP-AM, demonstrando alta confiabilidade nos cálculos. Esses dados indicam que o DoseCV apresenta desempenho compatível com os padrões estabelecidos pela ICRP, sendo adequado para estudos de dosimetria numérica com base em simulações no MCNP (JÚNIOR, 2025).

5.4 DIVULGAÇÃO CIENTÍFICA E SUBMISSÃO DO TRABALHO

O DoseCV foi apresentado no evento I Simpósio REPROLAM, realizado em novembro de 2024, ocasião em que recebeu um certificado de menção honrosa (Figura 10). A partir disso, o trabalho foi submetido através de um artigo à revista científica *Applied Radiation and Isotopes* e publicado (Figura 11).

Figura 10 – Certificado de Menção Honrosa recebida pelo trabalho no I SIMPOSIO REPROLAM



CERTIFICADO

La Comisión Científica del I Simpsio Reprolam, integración y experiencia compartida en protección radiológica, realizado en Recife de 5 a 8 de noviembre de 2024 otorgó.

MENCIÓN HONORÍFICA

Al trabajo presentado en el I Simposio: **DoseCV - a program to convert the absorbed dose of MRCP phantoms into simulations carried out in MCNP** de los autores **Válter José Coutinho Júnior, Willian Kenji Silva Nakano, Ana Paula Perini, Lucio Pereira Neves**.

Recife, 8 de noviembre de 2024.

Luiz Matta
Presidente del Simposio

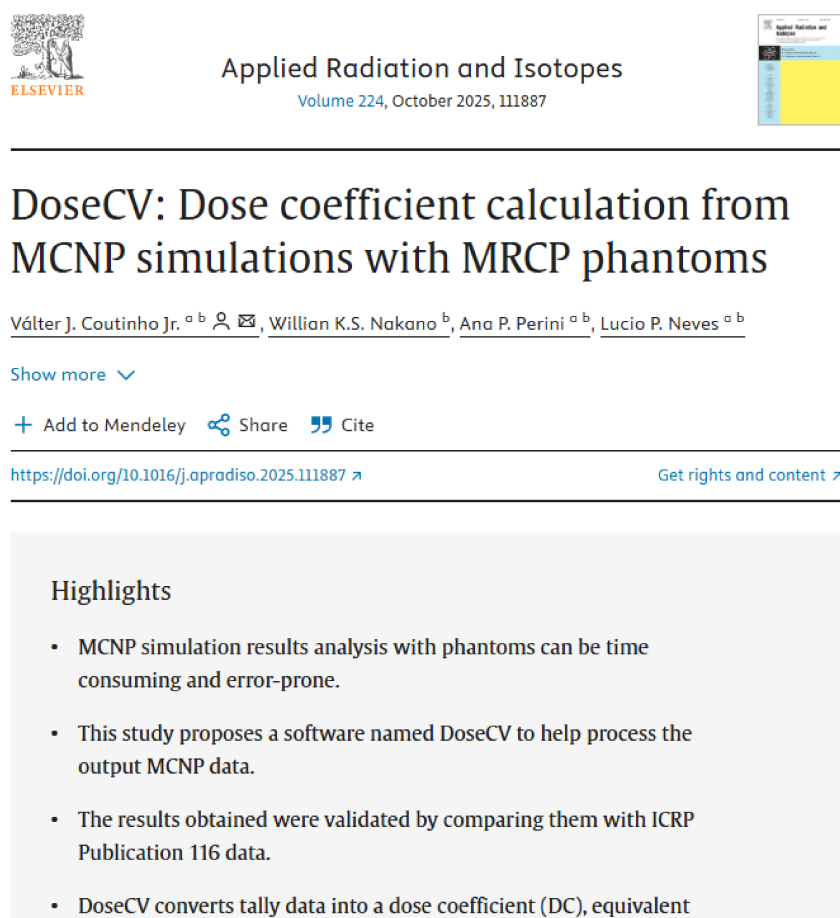
Helen Khoury
Coordinadora Reprolam



Red de Optimización de Protección Radiológica Ocupacional en América Latina.

Fonte: REPROLAM (2024).

Figura 11 – Captura de tela da publicação do artigo na revista Applied Radiation and Isotopes



Fonte: O Autor (2025).

6 CONCLUSÃO

O desenvolvimento do DoseCV representa uma solução prática para o desafio recorrente no processamento automatizado de dados simulados com os MRCPs da Publicação 145 da ICRP. Foi realizada a criação de um *software* que faz a leitura, pré-processamento e cálculo de diferentes grandezas dosimétricas com base em arquivos *mctal*, *tally* e em tabelas de dados dos objetos simulados. Sua interface gráfica foi desenvolvida para ser acessível a qualquer novo usuário, com recursos como dicas ao passar o cursor e direcionamentos para a documentação. Para sua disponibilização, foi realizada a compilação de um executável para sistema operacional *Windows*, ampliando o acesso à ferramenta.

A validação dos resultados obtidos pelo DoseCV foi confirmada por meio de testes comparativos com dados de referência publicados na ICRP 116 e em outras fontes reconhecidas, a partir da tese de doutorado de Válder José Coutinho Júnior (2025). A partir desses testes, observou-se que os dados processados pelo *software* das simulações realizadas obtiveram um erro relativo inferior a 5% para a maioria dos tecidos simulados, confirmando sua precisão nos cálculos.

Importante destacar que o DoseCV possui oportunidades de melhorias, dentre elas, a inclusão de suporte a diferentes objetos simuladores baseados nos MRCPs e a análise de simulações que tenham mais de um MRCP no mesmo cenário. Outra possibilidade de melhoria seria automatizar o reconhecimento dos tipos de arquivos, facilitando ainda mais o uso. Por fim, é possível também vislumbrar uma atualização no DoseCV onde ele também fará a geração de gráficos para análises.

Conclui-se, portanto, que o DoseCV se apresenta como uma ferramenta promissora para a física médica e áreas correlatas, podendo impactar positivamente de forma direta tanto o ambiente acadêmico quanto aplicações clínicas.

Neste trabalho, foram utilizadas ferramentas de Inteligência Artificial Generativa (ChatGPT, Perplexity, DeepL e Writefull do Overleaf) de forma pontual para sugerir sinônimos, revisões gramaticais de textos, traduções e auxiliar na reformulação de trechos complexos de explicações, com o único objetivo de torná-los mais claros. Todas as sugestões fornecidas foram revisadas, sendo incorporadas apenas ideias que se adequassem ao contexto, garantindo a originalidade e integridade do conteúdo.

REFERÊNCIAS

CHAPMAN, Carl; STOLEE, Kathryn T. Exploring regular expression usage and context in Python. *In*: PROCEEDINGS of the 25th International Symposium on Software Testing and Analysis. Saarbrücken, Germany: Association for Computing Machinery, 2016. (ISSTA 2016), p. 282–293.

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR. **Norma CNEN NN 3.01 – Requisitos Básicos de Radioproteção e Segurança Radiológica de Fontes de Radiação**. [S.l.: s.n.], 2024. <https://www.gov.br/cnen/pt-br>. Resolução CNEN 323/2024, p. 4.

FORSTER III, Robert Arthur; RISING, Michael Evan; SOOD, Avneet. The History of Monte Carlo and MCNP at Los Alamos [Slides]. *In*: LOS ALAMOS NATIONAL LAB. (LANL), LOS ALAMOS, NM (UNITED STATES). PROCEEDINGS of the 1st Annual 2021 MCNP User Symposium. [S.l.: s.n.], jul. 2021.

GRIFFIN, Keith *et al.* Dosimetric Impact of a New Computational Voxel Phantom Series for the Japanese Atomic Bomb Survivors: Children and Adults. **Radiation Research**, Radiation Research Society, v. 191, n. 4, p. 369–379, 2019.

HAN, Haegin. **POLY2TET (only for Linux)**. [S.l.: s.n.], 2025. <https://github.com/haeginh/POLY2TET>. Acesso em: 8 abr. 2025.

INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION. **O que são alucinações de IA?** [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 22 mar. 2025. Disponível em: <https://www.ibm.com/think/topics/ai-hallucinations>.

INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIOLOGICAL PROTECTION. **Adult mesh-type reference computational phantoms**. v. 49. [S.l.: s.n.], 2020. (ICRP Publication 145, 3).

INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIOLOGICAL PROTECTION. **ICRP Publication 103: The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection**. Oxford: Elsevier, 2007. v. 37. (Annals of the ICRP, 2-4). ISBN 978-0-7020-3048-2.

INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIOLOGICAL PROTECTION. **ICRP Publication 116: Conversion Coefficients for Radiological Protection**

Quantities for External Radiation Exposures. Oxford: Elsevier, 2010. v. 40. (Annals of the ICRP, 2-5). ISBN 978-1-4557-2858-9.

JÚNIOR, Válder José Coutinho. **Desenvolvimento de um procedimento de dosimetria numérica utilizando objetos simuladores de referência do tipo malha poligonal (MRCPs).** 2025. Tese de Doutorado – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.

KULESZA, J. A. *et al.* **MCNP® Code Version 6.3.0 Theory & User Manual.** Los Alamos, NM, USA, set. 2022. Available at https://mcnp.lanl.gov/pdf_files/TechReport_2022_LANL_LA-UR-22-30006_KuleszaEtAl.pdf.

PAIVA, Fábio Augusto Procópio de; NASCIMENTO, João Maria Araújo do; MARTINS, Rodrigo Siqueira; SOUZA, Givanaldo Rocha de. **Introdução a Python: Com Aplicações de Sistemas Operacionais.** Natal, Brasil: Editora IFRN, 2020.

PANDAS DEVELOPMENT TEAM. **pandas — Powerful data structures for data analysis, time series, and statistics.** [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 18 maio 2025. Disponível em: <https://pandas.pydata.org/docs/>.

PYINSTALLER DEVELOPMENT TEAM. **PyInstaller - Operating Mode.** [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 24 mar. 2025. Disponível em: <https://pyinstaller.org/en/stable/operating-mode.html>.

PYSIMPLEGUI. **PySimpleGUI Documentation - Cookbook.** [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 24 mar. 2025. Disponível em: <https://docs.pysimplegui.com/en/latest/cookbook/original/>.

PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. **Documentação Oficial do Python (versão 3.12).** [S.l.], 2025. Acessado em: 23 de março de 2025. Disponível em: <https://docs.python.org/pt-br/3.12/index.html>.

PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. **re — Regular expression operations.** [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 18 maio 2025. Disponível em: <https://docs.python.org/3/library/re.html>.

PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. **webbrowser** — Convenient Web-browser Controller. [S.l.: s.n.], 2025. Acessado em: 24 mar. 2025. Disponível em: <https://docs.python.org/3/library/webbrowser.html>.

SOARES, Maria R.; SANTOS, William S.; NEVES, Lucio P.; PERINI, Ana P.; BATISTA, Wilson O.G.; BELINATO, Walmir; MAIA, Ana F.; CALDAS, Linda V.E. Dose estimate for cone beam CT equipment protocols using Monte Carlo simulation in computational adult anthropomorphic phantoms. **Radiation Physics and Chemistry**, Elsevier, v. 155, p. 252–259, fev. 2019.

SOUZA LALIC, Susana de; NASCIMENTO SOUZA, Divanizia do; BAFFA, Oswaldo; D'ERRICO, Francesco. Novos Materiais Dosimétricos para Aplicações em Física Médica. **Revista Brasileira de Física Médica**, 2019.

TERINI, Ricardo Andrade; SANTANA CAMPELO, Maria Carolina de; ALMEIDA JR., José Neres de; HERDADE, Silvio Bruni; PEREIRA, Marco Aurélio Guedes. Monitoração de doses em radiologia: a calibração de medidores do produto kerma-área (P_{KA}). **Radiol Bras**, v. 46, n. 6, p. 358–366, nov. 2013.

Apêndices

APÊNDICE A – Documentação do Dose CV

Este apêndice apresenta a documentação do DoseCV, desenvolvida pelo autor como parte deste trabalho. Ela descreve as funcionalidades do programa, sua interface gráfica, o processo de entrada e saída de dados, e orientações gerais para o uso por parte de pesquisadores e profissionais da área de física médica.



Documentação DoseCV

2024

Sumário

1. Overview	3
2. Informações de Criação e Modificação	3
3. Linguagens e Bibliotecas.....	3
4. Fluxograma do software	4
5. Fluxograma do Processamento dos Dados.....	5
6. Interface do Programa	5
7. Funcionamento do Programa.....	9
8. Tabelas Geradas	11

1. Overview

O DoseCV tem como objetivo realizar a conversão de medidas dosimétricas relacionadas a simulações geradas a partir dos novos Phantoms disponibilizados pela ICRP. A partir do preenchimento das informações corretamente, o usuário terá acesso à 6 planilhas contendo informações em diferentes granularidades de dados, descrevendo o resultado do Coeficiente de Dose (D_c) nas unidades de (pGy.cm^2), CC (msv/Gy.cm^2) ou em unidades de dose reais, para diferentes órgãos e tecidos.

2. Informações de Criação e Modificação

Data	Modification	Reason
26/12/23	Criação	Criação e implantação do programa
12/10/24	Modificação	Implementação cálculo CC
22/12/24	Modificação	Implementação cálculo de dose em unidades reais

3. Linguagens e Bibliotecas

O software foi desenvolvido com a linguagem Python e contou, até o momento, com a utilização de 4 bibliotecas: pandas (*usada para manipulação e análise de dados, oferecendo estruturas de dados flexíveis que permitem o trabalho de dados com diferentes tipos e formatos de forma simples e objetiva*); re (*biblioteca nativa da linguagem que fornece funcionalidades para trabalhar com expressões regulares, que são usadas para fazer correspondência e manipulação de texto baseada em padrões*); pysimplegui (*permite o desenvolvimento de interfaces para o usuário de forma simples*); pyinstaller (*usada para*

“empacotar” programas Python em arquivos executáveis independentes) para transformação do script em um arquivo executável no sistema operacional Windows.

4. Fluxograma do software

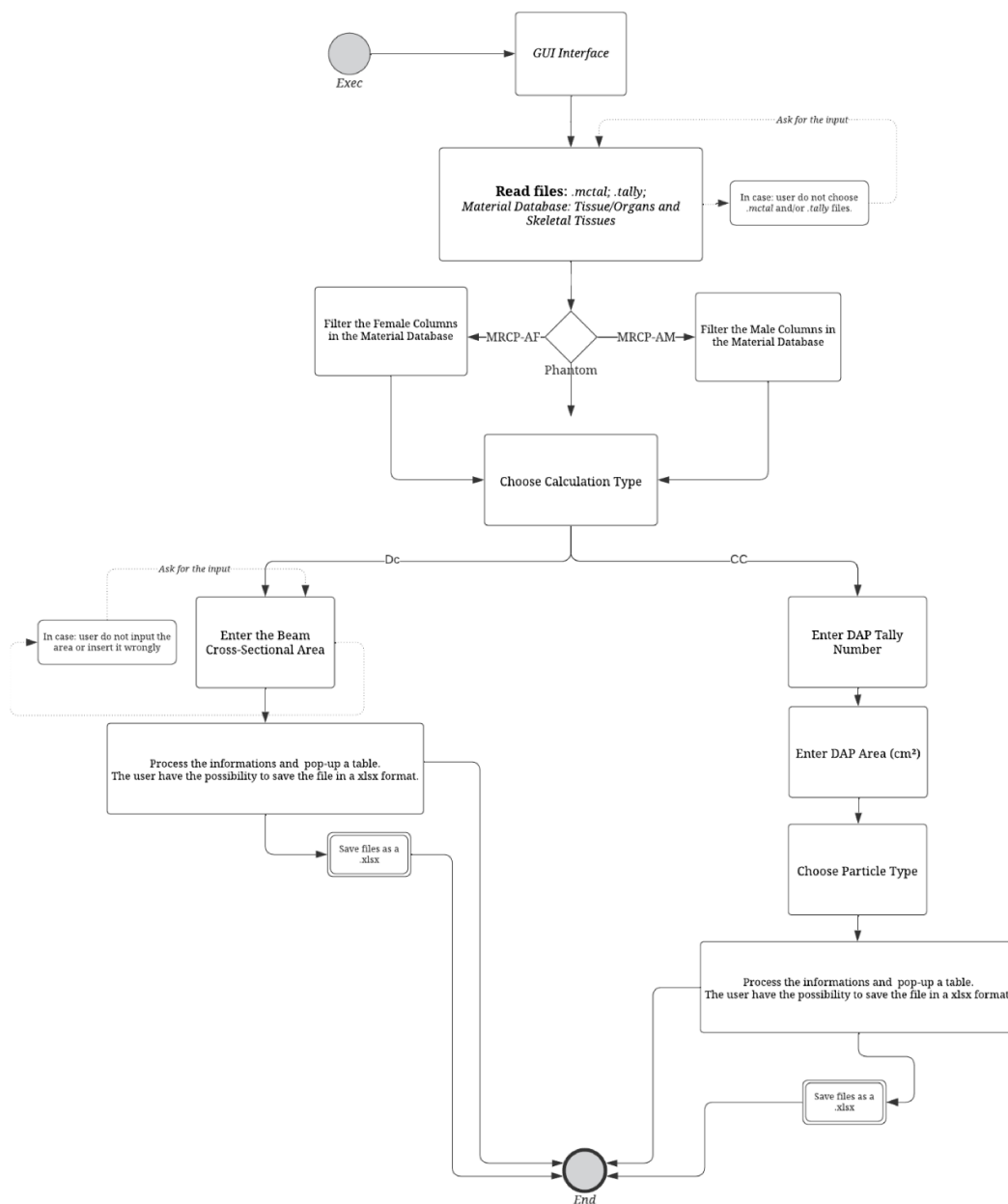


Figura 1: Fluxograma do funcionamento do software

5. Fluxograma do Processamento dos Dados

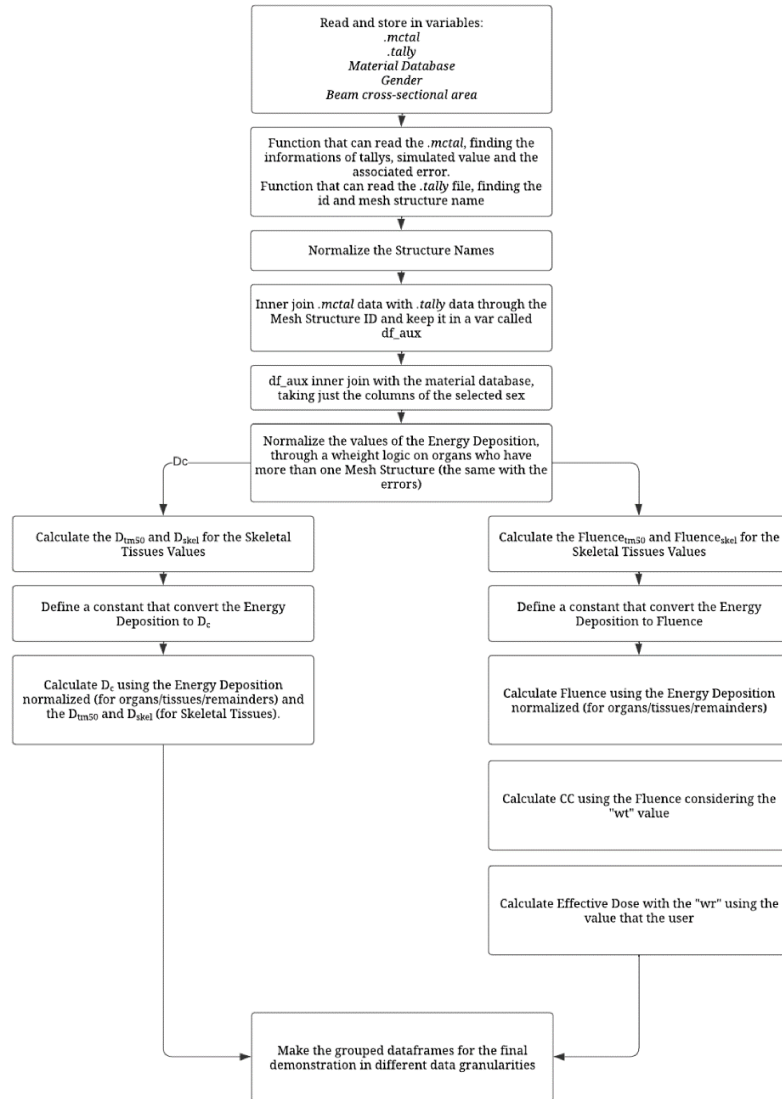


Figura 2: Fluxograma do processamento de dados.

6. Interface do Programa

A interface do programa, conta com o seguinte layout:

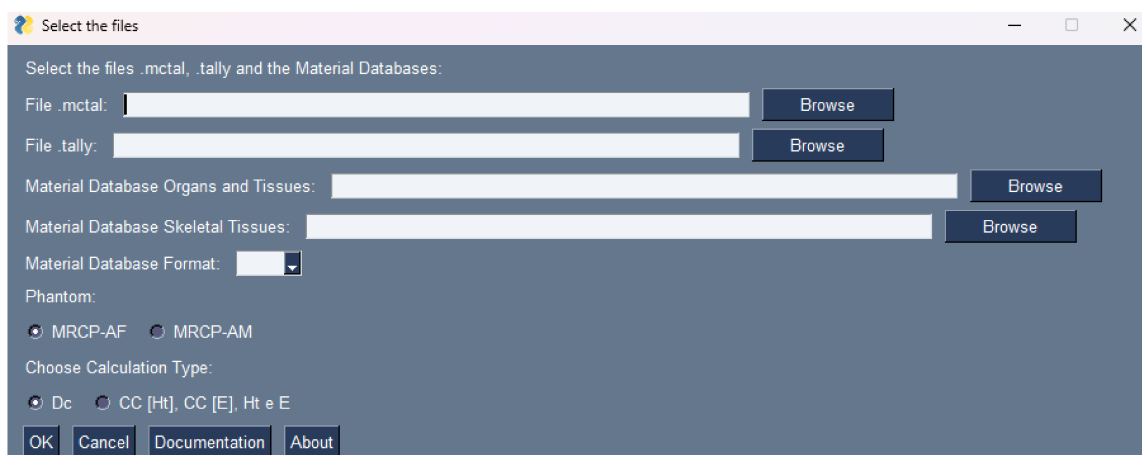


Figura 3: Interface do Programa apresentado

A seguir, será comentado o que selecionar em cada um dos campos acima, a qualquer momento o usuário poderá passar o cursor sobre os campos vazios e aguardar a tooltip que detalha o que deverá ser preenchido no respectivo campo. Segue-se a recomendação de que o usuário selecione, no canto direito, a escolha “*Browse*” e manualmente selecione o arquivo dentro das respectivas pastas que contém os mesmos. É possível inserir manualmente o *caminho+nome* do arquivo, porém visando evitar erros, recomenda-se a seleção manual. Será feita dentro do DoseCV a análise de apenas uma simulação de cada vez (portanto, não selecione mais de um arquivo por campo).

- File .mctal: Selecione o arquivo de saída da simulação descrito normalmente como “mctal”.
- File .tally: Selecione o arquivo .tally de saída da simulação, o mesmo usualmente é descrito como “Name.tally”.

- **Material Database Organs and Tissues:** Neste campo, o usuário deverá selecionar o arquivo que contém as informações de descrições dos órgãos e tecidos. O arquivo deverá conter o seguinte layout de Cabeçalho:

Tissue/organ	Tally Name	Tally	Male mass(g)	Female mass(g)	wt	Type
--------------	------------	-------	--------------	----------------	----	------

- Para auxiliar os usuários, será disponibilizado junto do DoseCV a planilha de *Organs and Tissues*.
- **Material Database Skeletal Tissues:** Neste campo, o usuário deverá selecionar o arquivo que contém as informações de descrições dos Organs and Tissues. O arquivo deverá conter o seguinte layout de Cabeçalho:

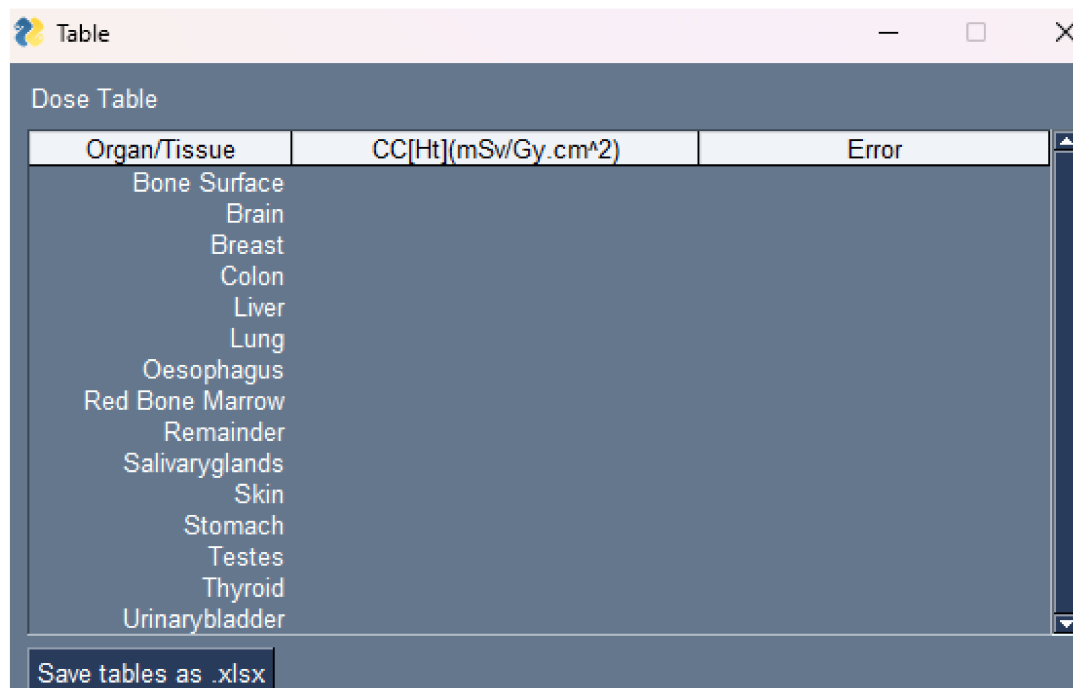
Bonesite	Bonesite Detail	Tally	Male - Active marrow mass(g)	Male - Endosteum mass(g)	Female - Active marrow mass(g)	Female - Endosteum mass(g)	wt
----------	-----------------	-------	------------------------------	--------------------------	--------------------------------	----------------------------	----

- Para auxiliar os usuários, será disponibilizado junto do DoseCV a planilha de *Organs and Tissues*.
 - Importante salientar que a maior diferença desta base, com a disponibilizada pela ICRP é o agrupamento de gêneros. No layout proposto acima foi realizada a inclusão de um prefixo de descrição (“Male –“ and “Female –“ nos campos de valores de massa (Active Marrow Mass e Endosteum Mass).
- **Material Database Format:** Escolha o formato da extensão dos arquivos de materiais escolhidos anteriormente. Importante que ambos tenham a mesma extensão (seja ela .xlsx ou .csv).
- **Select Phantom:** Selecione o Phantom da simulação (MRCP-AF ou MRCP-AM). Campo importante para capturar as informações da base de materiais.

- Choose Calculation Type:
 - Se Dc:
 - Enter the Beam Cross-Sectional Area: Preencha o valor em cm^2 , onde a separação da área deverá ser feita por ponto (.) e não vírgula (,).
 - Se CC [Ht], CC[E], Ht e E.
 - Enter the KAP Tally Number: Preencha o número do tally que identifica o objeto de simulação KAP.
 - Enter the KAP Tally Area (cm^2): Preencha o valor em cm^2 , onde a separação da área deverá ser feita por ponto (.) e não vírgula (,).
 - Enter de KAP, Air (Gy): Preencha o valor da dose do objeto de simulação, onde a separação da área deverá ser feita por ponto (.) e não vírgula (,).
 - Caso o usuário preencha, será apresentado ao mesmo nos resultados os valores de Ht e E.
 - Caso o usuário não preencha, será exibido os valores de Dose Equivalente e Dose Efetiva em unidades de Coeficiente de Conversão (CC).
 - Select the Particle Type: Selecionar se a simulação foi a partir de Photons, Electrons or Muons.
- Observações:
 - Nenhum arquivo seleciona anteriormente poderá estar aberto concomitantemente ao funcionamento do Programa.
 - Observa-se que na maioria dos casos, as tabelas de exemplo (“Skeletal Tissues” e “Organs and Tissues”) será a principal utilizada durante as simulações. Propôs-se a possibilidade de modificação, já que os usuários podem vir a utilizar diferentes componentes para fins de pesquisa.

7. Funcionamento do Programa

Após os devidos preenchimentos descritos no tópico anterior, o programa vai realizar os devidos cálculos e em seguida exibirá na tela para o usuário uma tabela com o seguinte layout:



Organ/Tissue	CC[Ht](mSv/Gy.cm ²)	Error
Bone Surface		
Brain		
Breast		
Colon		
Liver		
Lung		
Oesophagus		
Red Bone Marrow		
Remainder		
Salivaryglands		
Skin		
Stomach		
Testes		
Thyroid		
Urinarybladder		

Save tables as .xlsx

Figura 4: Tabela gerada a partir de uma simulação. Não possui valores, pois é apenas um teste de exibição para demonstrar na documentação. Na geração das suas informações, alguns órgãos e tecidos podem não coincidir com as informações acima. No teste acima a exibição é de CC[Ht], porém o campo é dinâmico e diretamente dependente das escolhas do usuário, portanto podem existir divergências.

O usuário tem a possibilidade de extrair um arquivo com a extensão .xlsx, que contém 6 planilhas de descrição dos cálculos. Para realizar este procedimento, o usuário deverá selecionar a opção “Save Tables as .xlsx”, onde será exibido o seguinte Pop-up

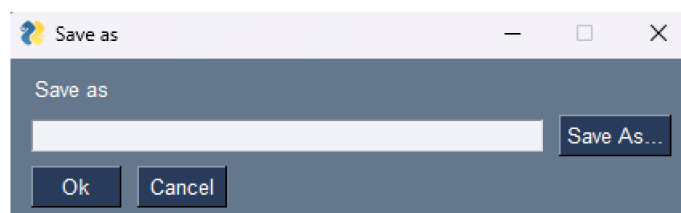


Figura 5: Pop-up para salvar as tabelas.

O usuário deverá em seguida clicar em “Save As...”, selecionar uma pasta e digitar um nome ao mesmo, conforme a imagem a seguir:

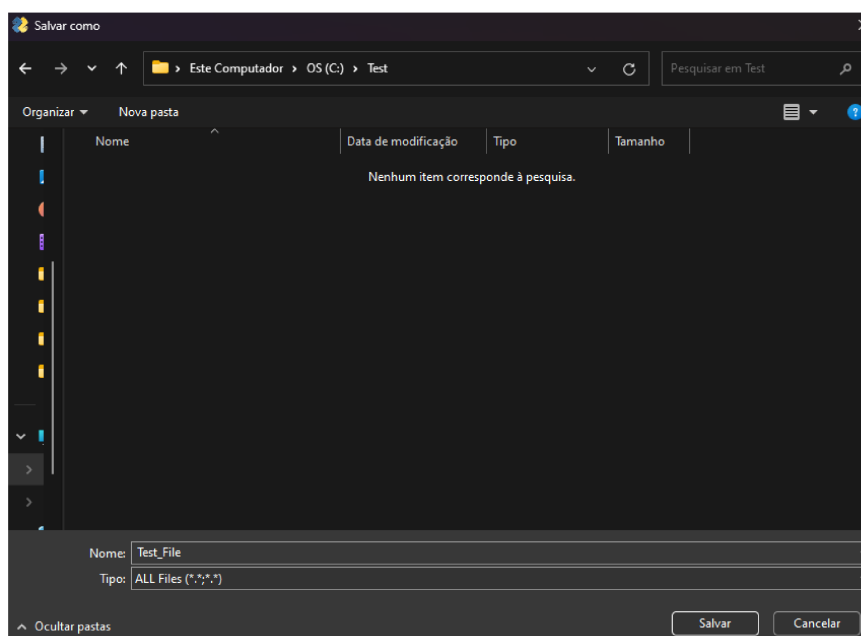


Figura 6: Demonstração de salvamento de tela. O usuário não precisa se preocupar com a opção “Type”, já que na forma padrão o programa vai realizar o salvamento em formato .xlsx.

Após clicar em “Save’, o usuário será direcionado à mesma tela demonstrada na Figura 5. Em seguida, será necessário apenas clicar em “Ok”:



Figura 7: Demonstração da forma como salvar as planilhas de resultado.

8. Tabelas Geradas

- Após realizar o salvamento das tabelas geradas anteriormente, o usuário terá um arquivo que contém 6 tabelas ao todo:
 - Dc/CC [Ht], CC[E], Ht e E: Contém uma sumarização do valor de D_c ou CC [Ht]/Ht dos tecidos e órgãos, com agrupamento de Red Bone Marrow e Bone Surface conforme padrão de demonstração da própria documentação, juntamente do erro associado.
 - Dc Group/CC Group: Diferenciação de grupo de tecidos e órgãos com a inclusão dos cálculos de D_c e seu erro associado individuais por órgão e *Remainders*. Obs: esta tabela não conta com a presença das informações de Skeletal Tissues.
 - Dc Detailed/CC Detailed: Cálculo de D_c /CC e seu erro associado com detalhamento de cálculo por estrutura na simulação. Se um órgão possui duas ou mais Mesh Structures dentro da simulação, será aqui a exibição do detalhamento de cada uma delas. Obs: esta tabela não conta com a presença das informações de Skeletal Tissues.
 - Assistant Table: Possui todas as informações detalhadas para realização dos cálculos de D_c /CC, contando com informação desde a “Energy deposition (MeV/g/source-particle)” e seu erro, até o cálculo final de D_c /CC. Obs: esta tabela não conta com a presença das informações de Skeletal Tissues.
 - Skeletal Tissue Detail: Informações de Skeletal Tissue estarão aqui. Contendo as massas correspondentes às simulações que tiveram compatibilidade com a base de materiais e valor de D_{skel} e D_{tm50} Junto do “Energy deposition (MeV/g/source-particle)” e seu erro associado.
 - Others: Aqui serão exibidos todos os órgãos que foram simulados, porém não tiveram nenhuma correspondência na base de materiais, comprometendo o cálculo de D_c . Se o usuário não encontrar um valor de D_c /CC [Ht], CC[E], Ht e E em uma das tabelas supracitadas e ele estiver dentro da presente planilha, confira se o órgão em questão possui valores dentro das bases de materiais.

- Para CC [Ht], CC[E], Ht e E, existe a sheet Effective Dose: faz o cálculo da dose efetiva e seu erro.