



Simulação de Intensidades de Espalhamento por Sistemas de Partículas Utilizando o Método de Elementos Finitos

Aluno:

Raphael Lima Alves

Orientador:

Prof. Dr. Cristiano Luis Pinto de Oliveira

Instituto de Física, Universidade de São Paulo - SP

Projeto FAPESP associado ao N° Processo: 2024/13288-7

Período coberto pelo relatório:

setembro de 2024 a agosto de 2025

SUMÁRIO

I	Introdução	1
II	Metodologia	5
I	Método dos elementos finitos	6
II	Construção de Modelos Tridimensionais por Elementos Finitos	8
III	Resultados e Discussão	11
IV	Conclusões e Perspectivas	15
V	Agradecimentos	17
VI	Apêndice	18

RESUMO

Experimentos de espalhamento de raios X são uma ferramenta valiosa para a análise de uma ampla variedade de sistemas, incluindo sólidos, líquidos e outros estados de agregação. A capacidade dos raios X de interagir com as nuvens eletrônicas dos átomos constituintes permite a investigação de estruturas em escala nanométrica. Uma breve introdução teórica sobre o tema foi apresentada, abordando as propriedades de forma e estrutura do sistema e contextualizando o problema de espalhamento.

Com base nisso, um algoritmo foi implementado em *python*TM para a construção de nanopartículas usando o método dos elementos finitos e para o cálculo do perfil de espalhamento de raios X e da função $p(r)$. A primeira parte do algoritmo foi inspirada no software BUILDER, desenvolvido pelo Professor Dr. Cristiano Oliveira Oliveira 2001 em Turbo Pascal 7. A lógica da implementação consiste na construção dos modelos a partir de uma grade de busca e parametrização. A segunda parte foi inspirada em uma implementação posterior do mesmo autor Oliveira et al. 2009, na qual ele desenvolveu um algoritmo em Fortran para o cálculo da intensidade e da função $p(r)$ com a fórmula analítica de Glatter Glatter 1980. Com base nesse trabalho, foi desenvolvido em *python*TM o algoritmo para o cálculo do espalhamento de raios X.

Para otimizar o desempenho, esses cálculos foram acelerados com bibliotecas *python*TM, como o Numba. Os resultados obtidos foram bastante promissores, demonstrando a capacidade de construir geometrias complexas e realizar cálculos rápidos de espalhamento de raios X e da função $p(r)$ associada a esses modelos. Espera-se que esta ferramenta seja útil, em particular, para estudantes e pesquisadores interessados em métodos de espalhamento a baixo ângulo.

I. INTRODUÇÃO

A técnica de espalhamento de raios X é uma poderosa ferramenta que permite o estudo de nanopartículas em solução, em pó, em gel, entre muitas outras possibilidades. Além de possibilitar a análise da forma da partícula e da estrutura formada no aglomerado (Oliveira (2011)), quando combinada com outras técnicas experimentais, ela fornece informações importantes sobre o sistema em estudo.

Ao incidir uma radiação com comprimento de onda próximo ao tamanho da estrutura de interesse, é possível obter informações sobre essa estrutura por meio do padrão de espalhamento gerado.

Sabendo que o comprimento de onda dos raios X é da ordem de $\lambda \approx 10^{-10}$ m, os objetos estudados também devem estar nessa ordem de grandeza.

O estudo geral de espalhamento a baixos ângulos pode ser iniciado com a análise do comportamento de uma única partícula fixa no espaço. Nesse cenário, assume-se que uma onda plana incide sobre pontos distintos da partícula, tomado como origem de coordenadas O e P tem sua posição dada como apresentados na figura 1, separados por um vetor \vec{r} (Guinier e Fournet 1955). A onda plana incidente pode ser expressa como:

$$\psi_{inc}(\vec{r}) = A_0 \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) \quad (1)$$

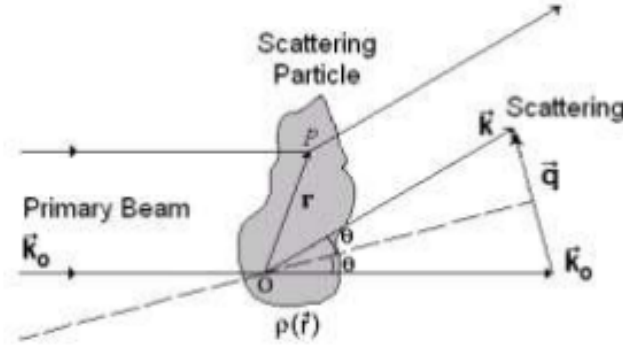


Figura 1: Representação do processo de espalhamento por uma partícula fixa (Oliveira (2011)).

Neste contexto, a radiação incidente interage majoritariamente com os elétrons da partícula espalhadora, de maneira que o potencial espalhador $\varphi(\vec{r})$ estará diretamente relacionado à função de densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$ da partícula. Podemos modelar esse potencial com um parâmetro de força de interação $\nu(\vec{r})$ e assim aplicar a teoria de perturbação para resolver a equação de Schrödinger (2) para essa interação (Feigin e Svergun 1987):

$$[\nabla^2 + k_0^2 + \nu\varphi(\vec{r})]\Psi_{inc} = 0 \quad (2)$$

A solução disso é uma série de potência de ν , nesse contexto, nos restringiremos ao termo linear, na chamada primeira aproximação de Born. A solução dessa equação envolve a teoria de perturbação e o uso de funções de Green. Pode-se demonstrar que a solução é a soma de uma onda plana com uma onda esférica. O resultado obtido é:

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) + \psi^{(1)}(\vec{r}) = A_0 \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) + \frac{A_0 \nu}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \varphi(\vec{r}') \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}') d\vec{r}' \quad (3)$$

Assumindo o regime de espalhamento elástico, onde é válida a primeira aproximação de Born, a onda espalhada apresenta o mesmo módulo da onda incidente, e a diferença entre os vetores de onda dos feixes incidente e espalhado define o vetor de transferência de momento no espaço recíproco, \vec{q} :

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0, \quad |\vec{q}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta) \quad (4)$$

Além disso, se o ponto de observação está a uma distância que é muito maior que o tamanho do centro espalhador, podemos aproximar que $\vec{r} \gg \vec{r}'$ e $|\vec{r} - \vec{r}'| \cong r$. Podemos expressar a equação da seguinte maneira:

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) + \psi^{(1)}(\vec{r}) = A_0 \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) + \frac{A_0}{4\pi r} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \int \nu\varphi(\vec{r}') \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}') d\vec{r}' \quad (5)$$

Podemos, então, definir o termo de espalhamento elástico como:

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{4\pi} \int \nu\varphi(\vec{r}') \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}') d\vec{r}' \quad (6)$$

Note que esta amplitude de espalhamento $f(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do potencial de interação $\nu(\vec{r}')$, que por sua vez é proporcional à densidade eletrônica da partícula $\rho(\vec{r}) = \nu\varphi(\vec{r})$ (Oliveira 2011).

A quantidade observável nos experimentos é a intensidade de espalhamento, que para uma única partícula $I_1(\vec{q})$ corresponde ao módulo quadrado da amplitude.

$$I_1(\vec{q}) = |f(\vec{q})|^2 = f(\vec{q})f^*(\vec{q}) \quad (7)$$

Nesse cenário, a estratégia para encontrar a transformada inversa de Fourier de $f(\vec{q})$ será através da teoria de convolução de transformadas de Fourier (Feigin e Svergun 1987) e escrever a intensidade de espalhamento de uma partícula como sendo:

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{q}) &= f(\mathbf{q})f^*(\mathbf{q}) = \mathcal{F}[\rho(\mathbf{r})]\mathcal{F}[\rho(-\mathbf{r})] = \mathcal{F}[\rho(\mathbf{r}) \star \rho(-\mathbf{r})] \\ &= \iint_V \rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r})d\mathbf{r}' \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})d\mathbf{r} = \int_V \gamma(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (8)$$

Pela equação (8), conseguimos encontrar a transformada inversa para o espaço real. Para a função $I(\mathbf{q})$, essa transformada corresponde à função de autocorrelação da partícula, $P(\mathbf{r}) = \gamma(\mathbf{r})$, também conhecida como função de Patterson. Essa função, por sua vez, carrega informações estruturais da partícula espalhadora e pode ser obtida através de uma transformada de Fourier (FT) inversa sobre o espaço recíproco dada pela equação 9.

$$\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\hat{V}} I_1(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})d\mathbf{q}. \quad (9)$$

Para partículas com orientações aleatórias, como é o caso típico de partículas dispersas em meios, realiza-se uma média sobre todas as possíveis orientações, o que leva à expressão 10 (Feigin e Svergun (1987), Guinier e Fournet (1955)):

$$\begin{aligned} I_1(q) &= \langle I_1(\mathbf{q}) \rangle_{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \int I_1(\mathbf{q})d\Omega \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{4\pi} \int_0^{4\pi} \gamma(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})d\Omega' r^2 dr d\Omega \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} r^2 dr \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \gamma(\mathbf{r})d\Omega' \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})d\Omega \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} r^2 \gamma(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr = 4\pi \int_0^{\infty} p(r) \frac{\sin(qr)}{qr} dr. \end{aligned} \quad (10)$$

Onde a função $p(r)$ é chamada função distribuição de pares de distâncias da partícula. (Glatter (1979)) Assim como a $\gamma(r)$ ela carrega informações sobre a estrutura da partícula e também pode ser expressa como a transformada inversa de Fourier da intensidade.

$$p(r) = \frac{r^2}{2\pi^2} \int_0^{\infty} q^2 I_1(q) \frac{\sin(qr)}{qr} dq \quad (11)$$

A função tem uma importância grande na solução do problema inverso de espalhamento. Este problema é ilustrado na Figura 2.

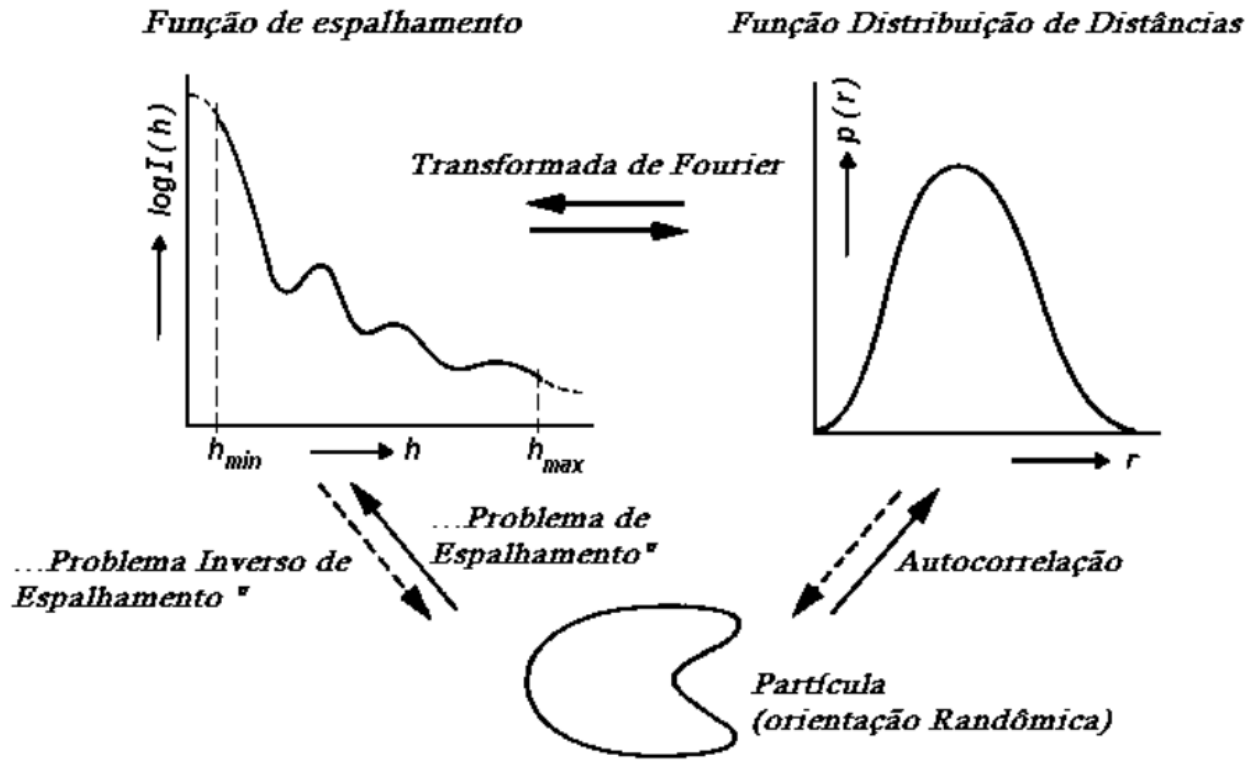


Figura 2: O problema inverso de espalhamento (Lindner e Zemb 1991)

O problema inverso de espalhamento é a tentativa de obter o tamanho, forma, e estrutura interna da partícula a partir da intensidade de espalhamento medida. Este problema não possui solução única, pois diversos sistemas podem apresentar o mesmo padrão de espalhamento. O que pode ser feito é partir da estrutura tridimensional para calcular a intensidade espalhada e a função de distribuição de distâncias da partícula.

Em experimentos de *Small Angle Scattering* (SAS), um feixe colimado incide sobre a amostra e o padrão de espalhamento é detectado em pequena faixa angular, como indicado na figura 3. Quando a fonte é de raios X, a técnica é chamada SAXS (*Small Angle X-ray Scattering*).

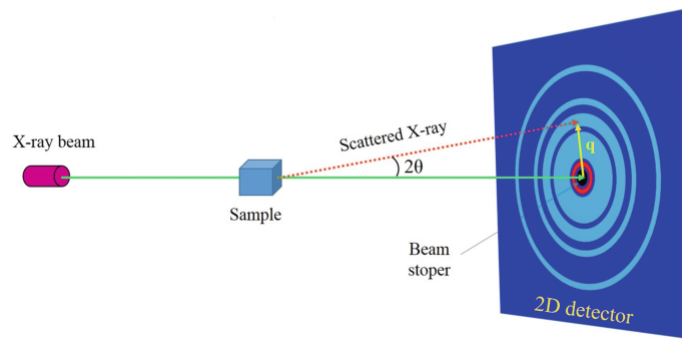


Figura 3: Esquema de uma configuração experimental de SAXS. O feixe de raios X proveniente de uma fonte é colimado utilizando elementos óticos (fendas, pinholes, etc) e incide na amostra. O feixe espalhado é coletado e pelo perfil de espalhamento é possível obter-se informações pertinentes à amostra. (Londoño et al. 2018)

Para sistemas diluídos de N partículas em solução, a intensidade espalhada pode ser representada por:

$$I(\vec{q}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f_i(\vec{q}) f_j(\vec{q}) \exp[i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)] \quad (12)$$

$$I(q) = N \langle f(q) \rangle^2 S(q) \quad (13)$$

em que N é o número de partículas iluminadas, $\langle f(q) \rangle^2 = P(q)$ representa o fator de forma de uma partícula, e $S(q)$ é o fator de estrutura, que descreve as interações entre partículas. Em soluções suficientemente diluídas, $S(q) \approx 1$, e a intensidade é diretamente proporcional ao fator de forma (Guinier e Fournet 1955):

$$I(q) = NP(q) \quad (14)$$

II. METODOLOGIA

A interpretação de dados de espalhamento a baixo ângulo baseia-se principalmente na comparação de dados experimentais com funções de modelo (Kratky 1963). Essa comparação pode ser feita no espaço recíproco com curvas de espalhamento ou no espaço real com a função de distribuição de pares de distâncias $p(r)$ mencionada anteriormente (Glatter (1979)). Em qualquer caso, é necessário conhecer as funções de modelo correspondentes. As funções de modelo de uma esfera podem ser calculadas analiticamente; as amplitudes de espalhamento de corpos triaxiais simples, como elipsoides, prismas e cilindros, podem ser calculadas analiticamente para qualquer orientação especial (Guinier e Fournet 1955).

Porém, não há modelos analíticos para geometrias mais complexas como o modelo na figura 4, devido à complexidade do cálculo.

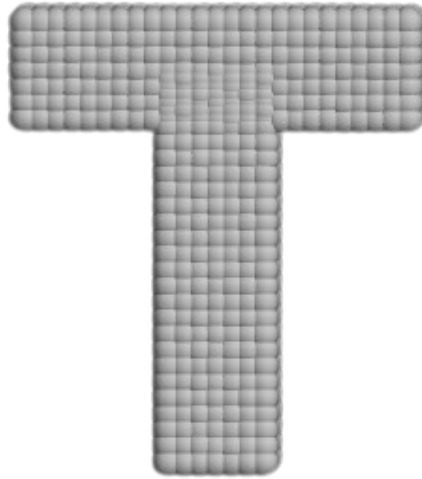


Figura 4: Geometria em formato de T construída a partir da combinação de prismas.

Alguns trabalhos implementaram modelos semi-analíticos, como Mittelbach 1964; Porod 1948. No entanto, muitas moléculas sob investigação não podem ser aproximadas por modelos triaxiais simples. O número de intervalos de integração

necessários para a média espacial aumenta conforme adicionamos mais geometrias ao cálculo, o que leva à inviabilidade computacional e imprecisões no cálculo.

I. Método dos elementos finitos

Uma alternativa para contornar esse problema é a utilização do método dos elementos finitos. Em resumo, qualquer modelo pode ser aproximado por um número finito de elementos homogêneos muito pequenos de densidade de espalhamento variável. Os elementos devem ser menores que os menores detalhes estruturais de interesse do modelo.

O método de elementos finitos com subunidades esféricas é amplamente utilizado em outras aplicações, como apresentado na seguinte dissertação (Oliveira 2001).

I.1 Intensidade de espalhamento

A intensidade de espalhamento $I(q)$ de um agregado de n esferas pode ser calculada pela fórmula de Debye (Debye 1915) conforme a expressão 15:

$$I(q) = \sum_{i=1}^n g_i^2 \phi_i^2(q) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n g_i g_k \phi_i(q) \phi_k(q) \frac{\sin(d_{ik}q)}{d_{ik}q} \quad (15)$$

onde $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$, sendo λ o comprimento de onda da radiação e 2θ o ângulo de espalhamento. g_i é o fator de ponderação da i -ésima esfera, $\phi_i(h)$ é o fator de forma para uma esfera de Raio R_i da i -ésima esfera, e d_{ik} é a distância entre os centros das esferas i e k . O fator de ponderação g_i é dado por:

$$g_i = \rho_i V_i = \rho_i \frac{4}{3} \pi R_i^3 \quad (16)$$

onde ρ_i é a densidade eletrônica da i -ésima esfera (de raio R_i) e V_i é o volume dessa esfera. O fator de forma analítico de uma esfera $\phi_i(q)$ é definido por:

$$\phi_i(h) = \frac{3}{(R_i q)^3} [\sin(R_i q) - (R_i q) \cos(R_i q)] \quad (17)$$

Entretanto, a equação (15) contém uma soma dupla, o que torna seu cálculo computacionalmente custoso para corpos formados por muitas subunidades. (Glatter 1972) propôs um procedimento para simplificar este cálculo, por meio da construção de um histograma inicial $h(r_k)$ de pares de distâncias r_k , distribuídos em n_b canais. Neste caso, assume-se que as subunidades possuem o mesmo raio, o que resulta em uma soma simples:

$$I(q) = (f(q))^2 \left[n + 2 \sum_{k=1}^{n_b} h(r_k) \frac{\sin(qr_k)}{qr_k} \right] \quad (18)$$

A limitação do método está relacionada ao fato de que as subunidades esféricas passam a apresentar um fator de forma após um dado valor de q . Antes desse limite, a contribuição das esferas é praticamente constante, mas a curva de espalhamento do modelo como um todo torna-se incorreta nessa região.

Isso significa que a relação pode ser aplicada considerando-se o valor máximo de q , representado na equação (19), onde r é o raio da subunidade esférica Glatter 1972. É possível observar a concordância entre as curvas, conforme mostrado na Figura 5, até um certo valor em q . A partir desse ponto, surge uma discordância devido ao efeito da forma da subunidade.

Os cálculos de intensidade para o modelo de uma esfera, cujo fator de forma teórico é dado pela equação 17, foram realizados pela rotina em *Python*TM desenvolvida.

$$q_{\max} < \frac{4.5}{r} \quad (19)$$

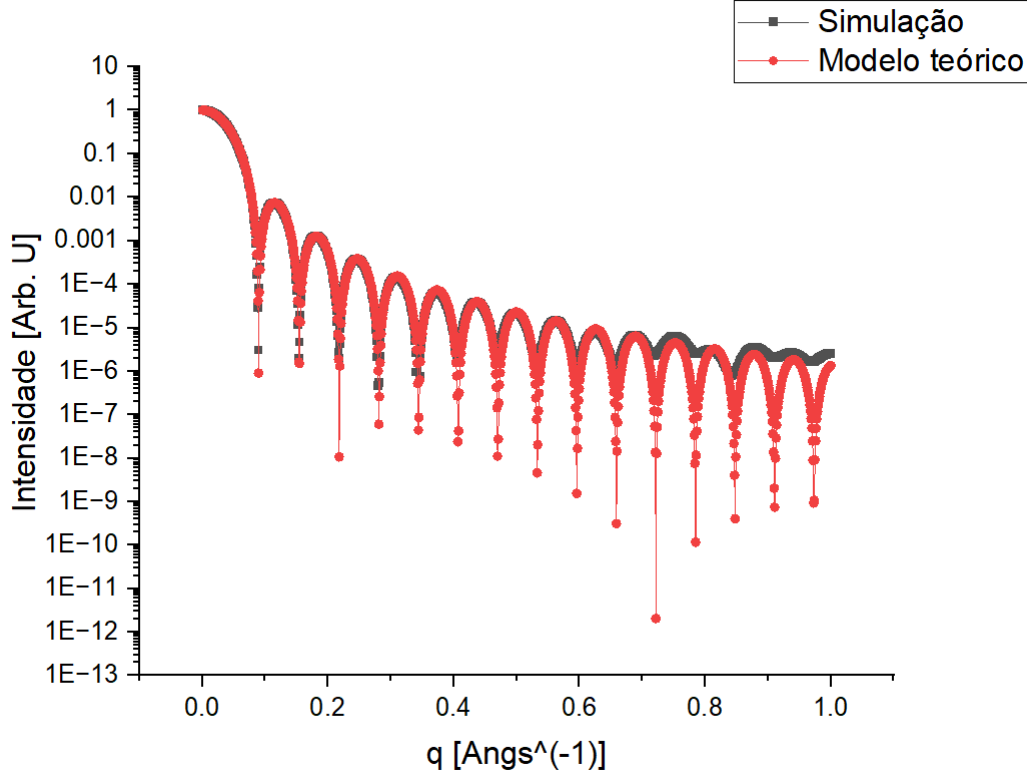


Figura 5: Comparação entre a curva simulada de uma esfera e sua curva teórica de espalhamento.

I.2 A função de distribuição de distância entre pares

A função de distribuição de distâncias entre pares $p(r)$ quantifica a probabilidade de ocorrência de pares de pontos separados por uma distância r dentro de uma estrutura, sendo útil para a modelagem do espalhamento e análise da forma (Glatter (1979)). A função de distribuição de distância $p(r)$ está correlacionada com a intensidade de espalhamento $I(q)$ por meio da transformada de Fourier, como indicado na equação (11).

Pode-se utilizar essa relação para o cálculo direto de $p(r)$, mas existe uma limitação prática no processo de integração devido ao limite de integração infinito na Eq. (11). É possível, entretanto, definir uma equação análoga à fórmula de Debye no espaço real. A função de distribuição de distância $p(r)$ pode ser expressa como (Glatter 1980):

$$p(r) = \sum_{i=1}^n \rho_i^2 p_0(r, R_i) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n \rho_i \rho_k \bar{p}(r, d_{ik}, R_i, R_k) \quad (20)$$

$p_0(r, R_i)$ representa a função de distribuição de distâncias de uma esfera de raio R_i com densidade eletrônica unitária.

Já $\bar{p}(r, d_{ik}, R_i, R_k)$ corresponde ao termo cruzado de distribuição de distâncias entre as esferas i e k , com raios R_i e R_k , separadas por uma distância d_{ik} .

A derivação dessas equações é bastante trabalhosa; para mais detalhes (Glatter 1980).

I.3 Comparação de resultados

A metodologia descrita acima foi implementada em Fortran pelo professor Dr. Cristiano Oliveira em alguns trabalhos (Oliveira et al. 2009). Esse código foi tomado como base para a construção da versão em *Python*TM, na qual foram implementados testes para comparação. Podemos observar o resultado dessa comparação das implementações da $p(r)$ para uma esfera de 50 nm. O formato em sino é bem expressivo. Além disso, teoricamente, o fim da $p(r)$ está relacionado ao diâmetro da molécula. Nesse caso, podemos notar que a curva se encerra em 100 nm, o que corresponde ao diâmetro da esfera. Observa-se também uma grande convergência entre as curvas, como apresentado na Figura 6.

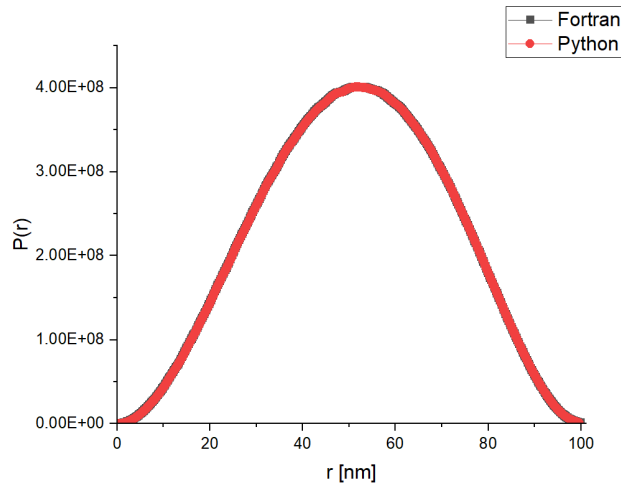


Figura 6: Comparação da implementação da $p(r)$ em Fortran (Oliveira et al. 2009) e Python para uma esfera de 100 nm.

II. Construção de Modelos Tridimensionais por Elementos Finitos

Para a simulação do espalhamento de raios X, os modelos tridimensionais foram gerados computacionalmente através de um método de elementos finitos descrito acima onde a estrutura contínua da partícula é discretizada e representada por um conjunto de um grande número de subunidades esféricas idênticas, cada uma com um centro nas coordenadas (x, y, z) e um peso associado, que representa sua densidade eletrônica relativa. A lógica de construção foi implementada em um script Python, inspirado na metodologia do programa BUILDER (Oliveira 2001). No entanto, o programa foi feito em Turbo Pascal 7 (TP7), uma linguagem de programação muito utilizada décadas atrás devido ao fato de ser estruturada. Na realidade, esta linguagem é uma das precursoras da linguagem *Python*TM. TP7 é uma linguagem obsoleta e programas nesta linguagem somente funcionam em computadores com arquiteturas antigas (WinXP), por exemplo.

Do ponto de vista da construção de modelo, o parâmetro fundamental que controla a fidelidade do modelo é a resolução da grade, d_{grid} , que define a distância fixa entre os centros das subunidades esféricas adjacentes. Um valor menor de d_{grid} resulta em um maior número de subunidades e, conseqüentemente, um modelo de maior resolução. A figura 7 representa as diferenças entre modelos obtidos ao se alterar esse parâmetro.

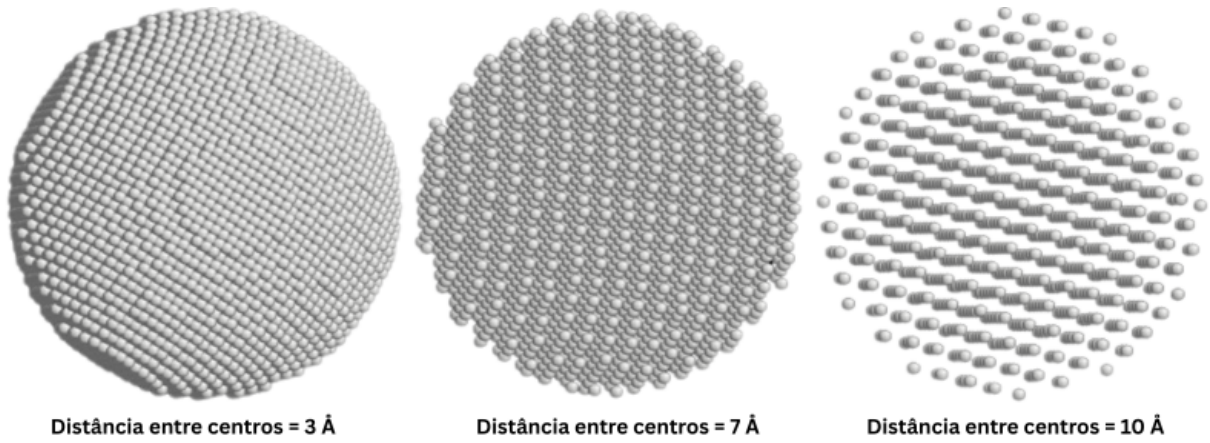


Figura 7: Exemplo representativo da dependência entre a distância de entre os centros da subunidades na construção do modelo.

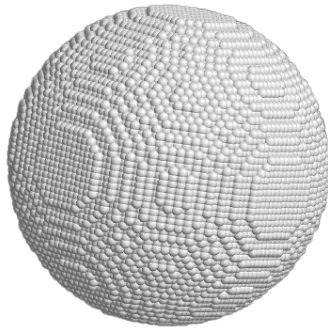
Para garantir a homogeneidade do volume preenchido e evitar artefatos de empacotamento, o raio de cada subunidade (R_{sub}) é calculado em função de d_{grid} , de modo que o volume da esfera seja igual ao volume da célula cúbica que a contém. Isso força uma leve sobreposição entre subunidades vizinhas, seguindo a relação:

$$R_{sub} = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} d_{grid} \approx 0.62035 \cdot d_{grid} \quad (21)$$

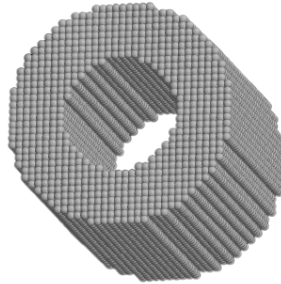
Duas estratégias de geração foram implementadas para abranger diferentes tipos de geometrias.

II.1 Modelagem de Geometrias Sólidas: Método da Grade e Verificação

Para a construção de volumes sólidos (esferas, cilindros, prismas, elipsoides), foi utilizado o método da "Grade e Verificação". Primeiramente, um paralelepípedo de busca (*bounding box*) é definido em torno das dimensões máximas da geometria desejada. Este volume é então preenchido com uma rede cúbica de pontos com espaçamento d_{grid} . Por fim, cada ponto da rede é testado contra a inequação matemática que define o interior da geometria. Os pontos que satisfazem a condição são mantidos como centros de subunidades. Para um elipsoide triaxial com semieixos a, b, c , por exemplo, a condição é $(x/a)^2 + (y/b)^2 + (z/c)^2 < 1$. As figuras 10 apresenta alguns modelos que podem ser construídos a partir dessa metodologia.



((a)) *Modelo 3D da Esfera*



((b)) *Modelo 3D do Cilindro Oco*

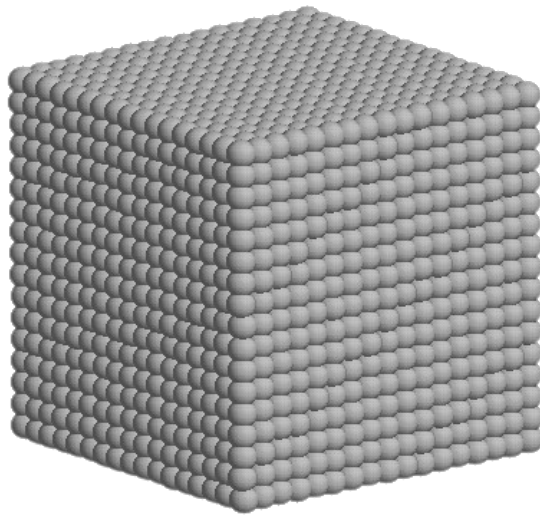
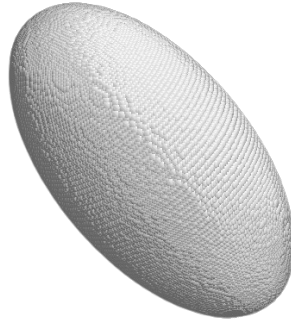


Figura 9: *Modelo 3D do Cubo*

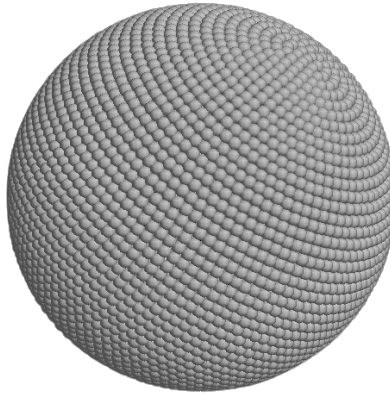
Figura 10: *Exemplos de geometrias sólidas geradas.*

II.2 Modelagem de Cascas: Discretização por Comprimento de Arco

Para geometrias ocas de revolução (cascas esféricas e elipsoidais), uma abordagem mais sofisticada foi necessária para garantir a distribuição uniforme das subunidades sobre a superfície. O método baseia-se na discretização do perfil 2D gerador (uma elipse com semieixos a e b) ao longo de seu comprimento de arco. O comprimento total do arco do perfil é calculado via integração numérica. Este comprimento é então dividido em segmentos de tamanho aproximadamente igual a d_{grid} , determinando as posições onde os anéis de subunidades serão gerados. O ângulo correspondente a cada posição de arco é obtido por meio de uma função de interpolação, garantindo o espaçamento uniforme na superfície. A rotação destes anéis em torno do eixo principal da elipse gera a casca 3D final conforme apresentado nas figuras 11(a) e 11(b).



((a)) Modelo 3D da casca de elispoide



((b)) Modelo 3D de uma casca esférica

Figura 11: Exemplos geometrias de casca, casca de elispoide (a) e casca de esfera(b) isso demonstra a geração de superficies com a parametrização de arcos.

III. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A metodologia descrita na seção anterior foi aplicada com sucesso para a construção de modelos tridimensionais e o subsequente cálculo da intensidade de espalhamento associada. O uso do método dos elementos finitos, com subunidades esféricas, mostrou-se particularmente eficaz para representar uma ampla variedade de geometrias, tanto regulares quanto compostas.

Diferentemente de abordagens puramente analíticas ou semi-analíticas, que restringem as formas modeláveis a geometrias com simetrias específicas, a abordagem por elementos finitos permite a livre combinação de diferentes estruturas básicas

(como esferas, cilindros, elipsoides e cascas), possibilitando a simulação de partículas com topologias mais complexas. Essa flexibilidade representa uma vantagem significativa no contexto da análise de espalhamento a baixo ângulo.

Nas Figuras 12 e 14, são apresentados exemplos de objetos com geometrias bastante complexas para os quais foi possível calcular a intensidade de espalhamento de raios X e a função de distribuição de pares $p(r)$. Esses resultados ilustram a robustez e a versatilidade da metodologia proposta.



Figura 12: Modelo tridimensional do personagem BB-8, construído a partir do software em Python.

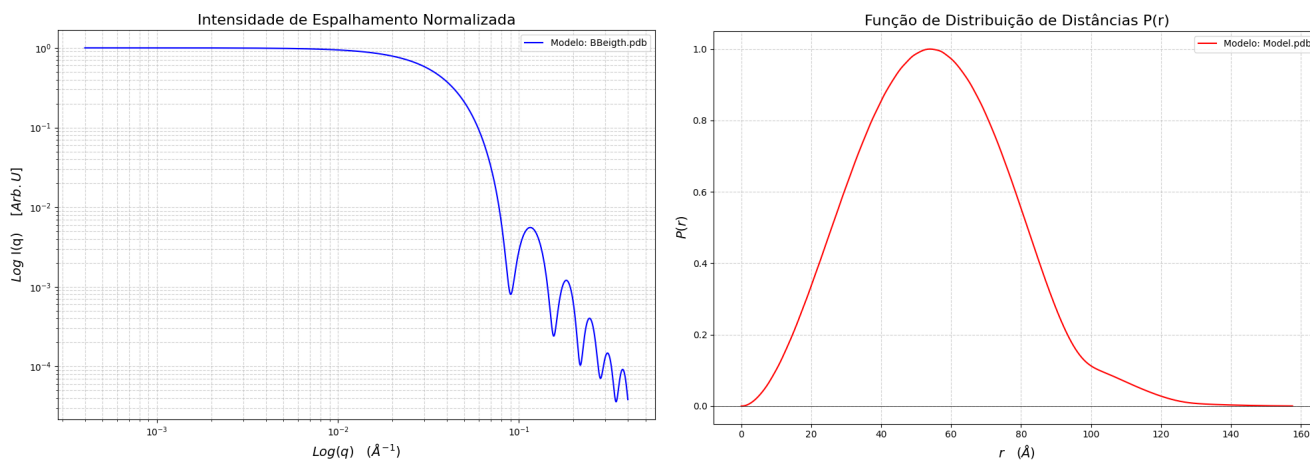


Figura 13: Intensidade de espalhamento de raios X e função $p(r)$ associada ao modelo do BB-8.

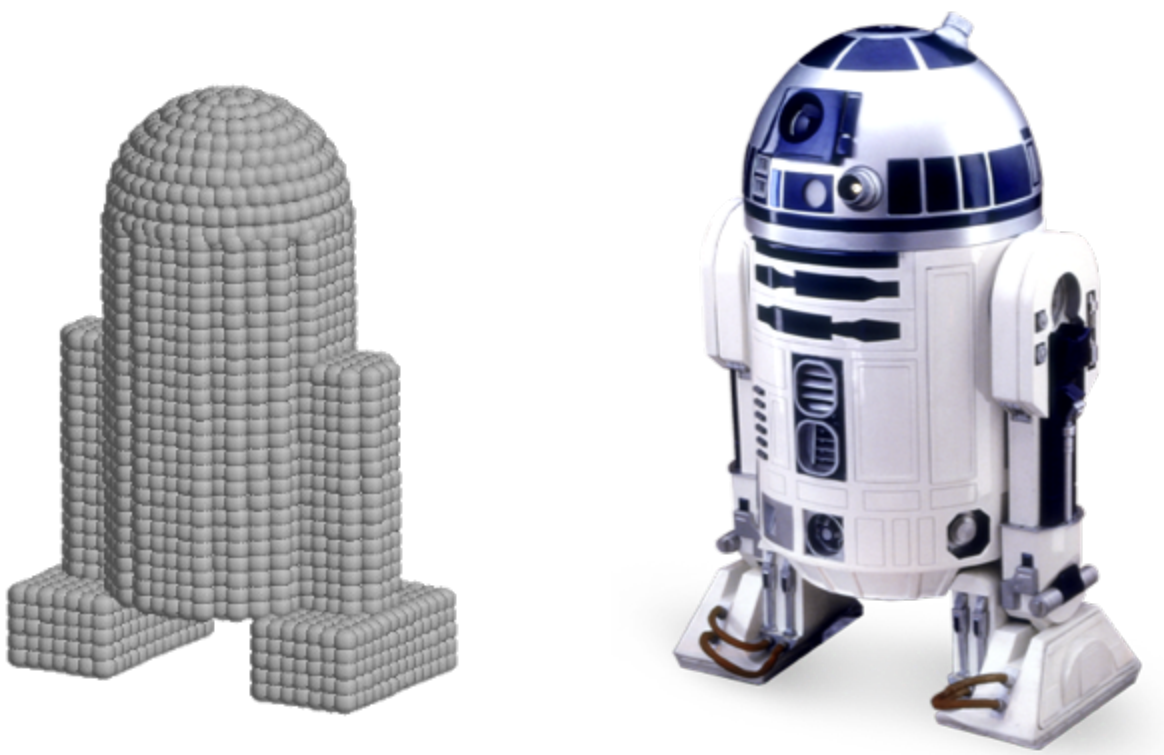


Figura 14: Modelo tridimensional do personagem R2-D2, construído a partir do software em Python.

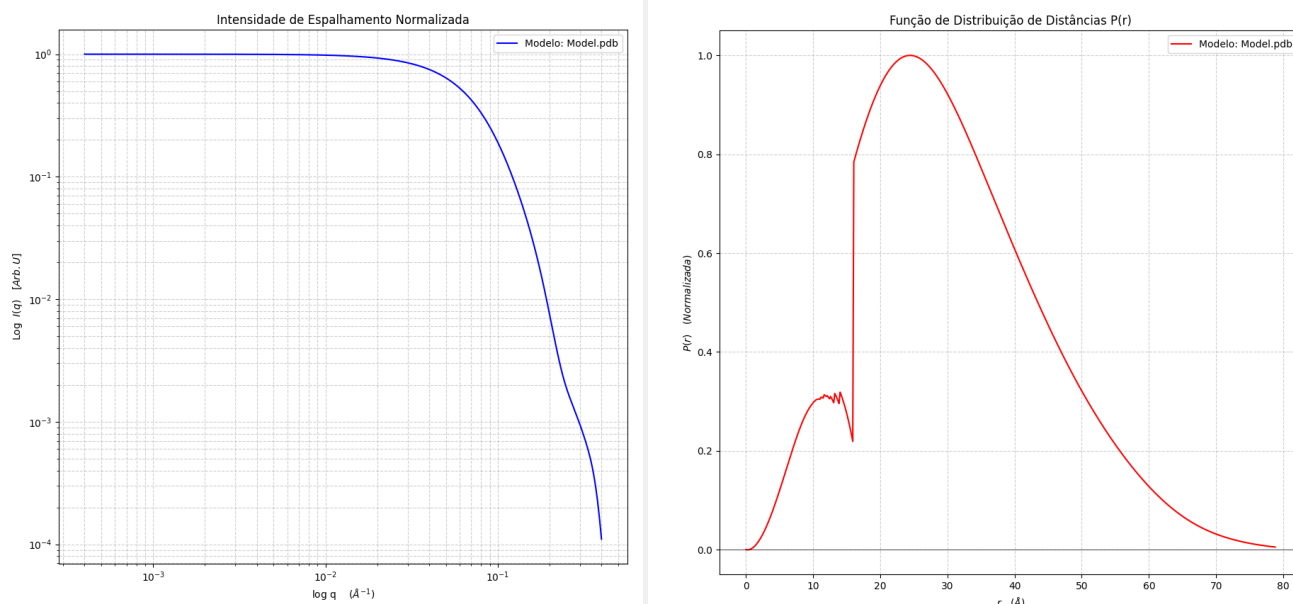


Figura 15: Intensidade de espalhamento de raios X e função $p(r)$ associada ao modelo do R2-D2.

Outro aspecto importante da implementação é a **atribuição de pesos individuais às subunidades esféricas**, o que permite simular variações na densidade eletrônica local da estrutura modelada. Essa funcionalidade foi incorporada por meio de modificações nos arquivos PDB (*Protein Data Bank*) gerados, nos quais a densidade eletrônica é armazenada no campo de

ocupação dos átomos, respeitando o padrão do formato (Bernstein et al. 1977).

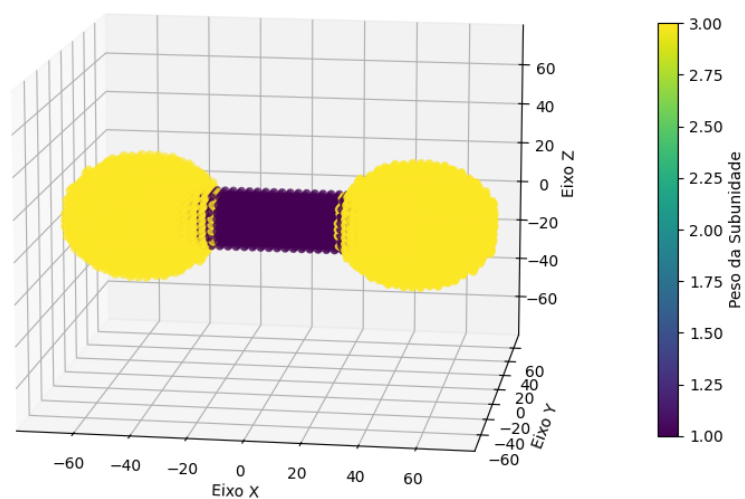


Figura 16: *Modelo de halter construído com subunidades de pesos diferentes*

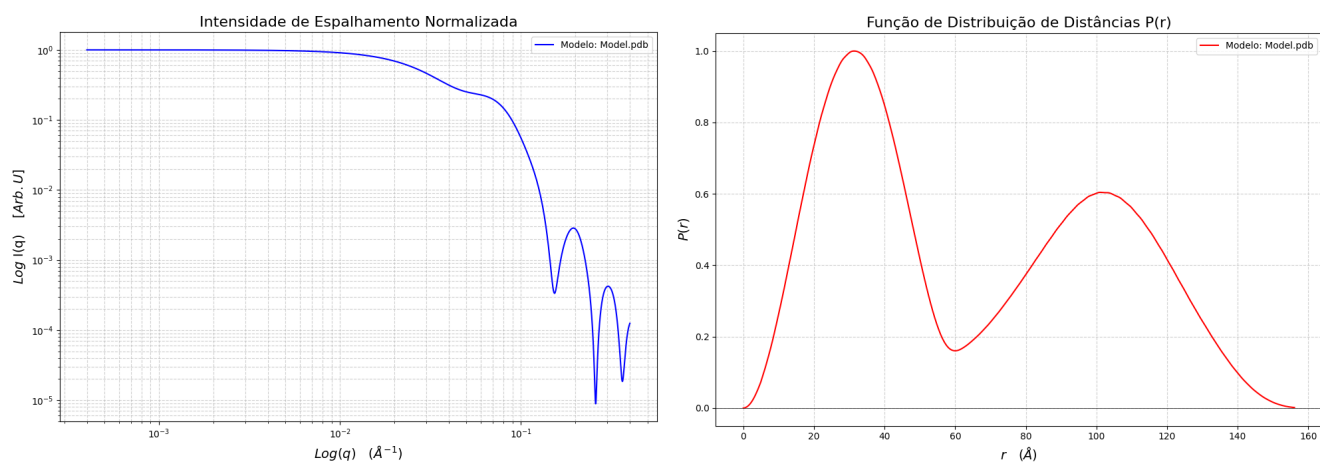


Figura 17: *Intensidade de espalhamento de raios X e função $p(r)$ associadas ao modelo de halter com diferentes pesos.*

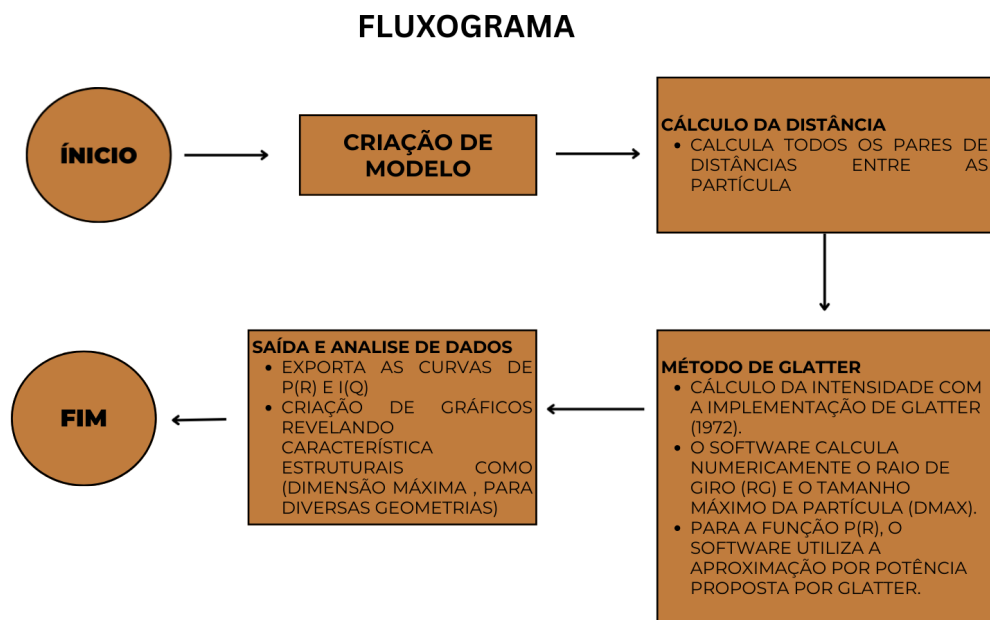


Figura 18: Fluxograma do procedimento computacional. Etapas de criação do modelo, cálculo de distâncias, aplicação do método de Glatter.

Os cálculos de intensidade de espalhamento para esses modelos complexos foram executados de forma eficiente graças à utilização da biblioteca Numba, que compila trechos críticos do código Python para linguagem de máquina em tempo de execução, acelerando substancialmente a performance dos *loops* aninhados necessários para a construção do histograma de distância.

IV. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O trabalho realizado resultou na construção de um algoritmo robusto para a modelagem tridimensional de partículas e o cálculo da intensidade de espalhamento de raios X, totalmente implementado em Python. Esta implementação representa uma alternativa moderna e acessível em relação a códigos legados desenvolvidos em linguagens como Fortran e Turbo Pascal 7 (TP7).

Apesar da percepção comum de que o Python é uma linguagem lenta em comparação com linguagens compiladas, o uso de bibliotecas como Numba demonstrou ser uma solução eficaz para contornar essas limitações de desempenho. A aceleração dos cálculos com Numba permitiu a execução eficiente de operações computacionalmente intensivas, como o cálculo do histograma de distâncias e a avaliação da função de distribuição de pares $p(r)$.

Para avaliar o impacto do uso de Numba, foram realizados testes comparativos entre a versão em Python com e sem Numba. A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos utilizando o mesmo arquivo PDB: uma esfera de 50 nm composta por 8217 elementos.

Tabela 1: Comparação de eficiência entre Python com e sem Numba

Etapa	Python sem Numba	Python com Numba
Número de elementos ($n_{elementos}$)	8217	8217
Tempo - Propriedades do Modelo	105.5 s	1.775 s
Raio de Giro (R_g)	38.906 Å	38.817 Å
Dimensão Máxima (D_{max})	99.599 Å	99.599 Å
Tempo - Histograma de Distâncias	217.74 s	2.503 s
Tempo - Cálculo da Intensidade	60.4514 s	2.070 s
Tempo - Cálculo de $P(r)$	0.6257 s	2.845 s
Tempo Total	6 min 24 s	9.193 s

Os resultados na Tabela 1 mostram o impacto da biblioteca Numba na aceleração dos cálculos. A versão sem otimização em Python levou cerca de 6 minutos e 24 segundos, enquanto a versão com Numba reduziu esse tempo para apenas 9 segundos. O ganho de desempenho foi mais notável no cálculo do histograma de distâncias, que passou de 217,74 segundos para 2,503 segundos, confirmando ser o principal desafio na versão sem otimização. Importante notar que a otimização com Numba não comprometeu a precisão dos resultados. Valores físicos como o raio de giro (R_g) e a dimensão máxima (D_{max}) permaneceram praticamente idênticos em ambas as versões. Com os desenvolvimentos realizados neste trabalho foi possível desenvolver uma ferramenta flexível e extensível. Esta ferramenta será extremamente útil para diversas aplicações, em particular para alunos e pesquisadores interessados em métodos de espalhamento a baixo ângulo.

Como etapa futura, foi iniciada a criação de uma interface web para o algoritmo desenvolvido, com o objetivo de disponibilizar uma ferramenta gráfica para construção de modelos e simulação de espalhamento. A ideia é tornar o acesso ainda mais intuitivo e acessível para a comunidade científica, especialmente para aqueles sem familiaridade com programação.



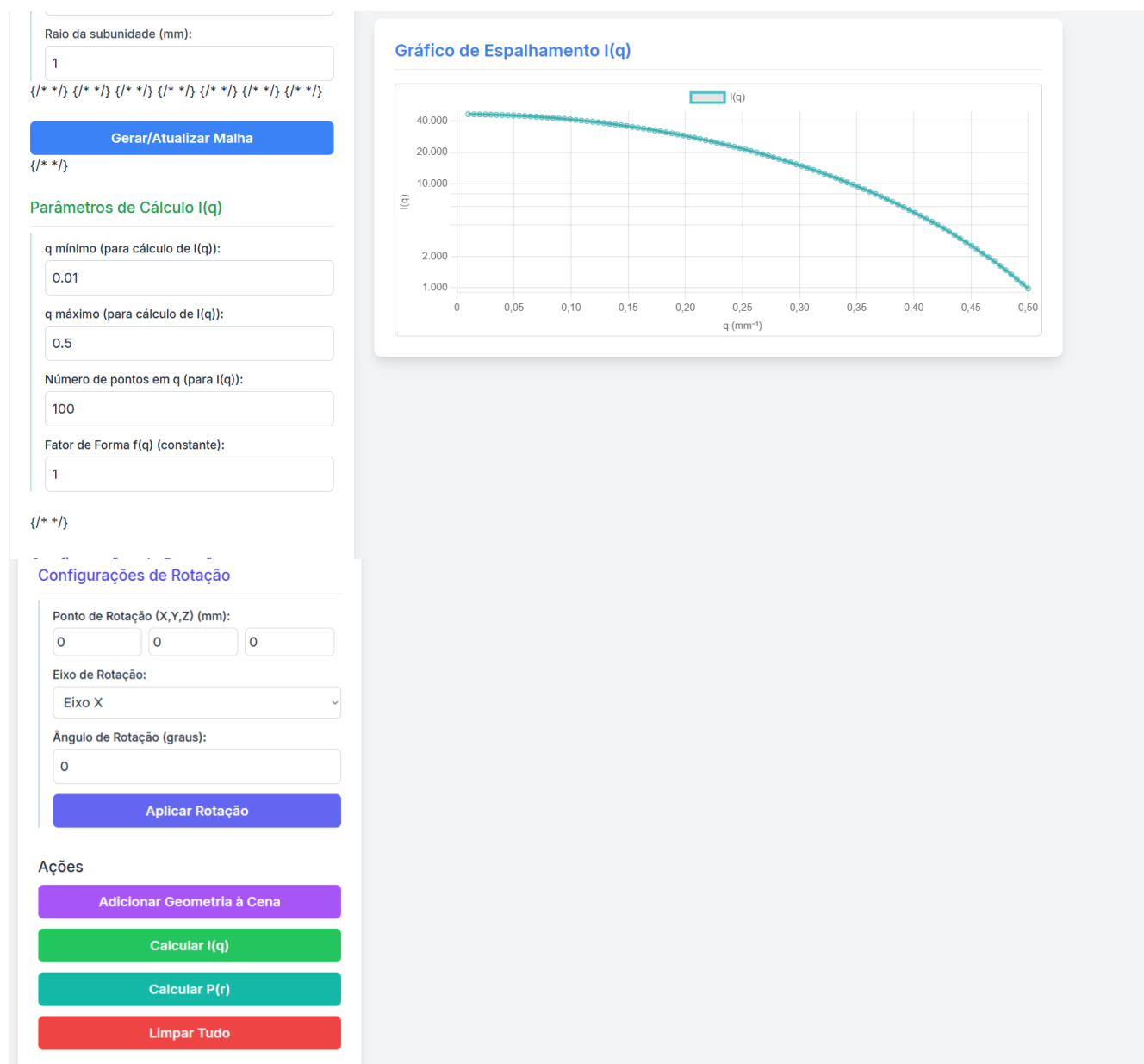


Figura 19: Protótipo da interface web para construção de modelos e cálculo de espalhamento.

Essa abordagem representa um passo importante para transformar a ferramenta em um recurso educacional e científico de uso aberto, permitindo que qualquer usuário interessado possa criar modelos, visualizar estruturas e obter perfis teóricos de espalhamento diretamente no navegador. A consolidação dessa interface será foco de trabalho futuro, com a intenção de disponibilizá-la como um serviço para a comunidade de espalhamento de raios X.

V. AGRADECIMENTOS

Queria agradecer à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio durante este projeto. Agradeço ao Prof. Dr. Cristiano Luis Pinto de Oliveira pela paciência e pelo acompanhamento nos projetos. Também agradeço ao Gabriel Brito Granado, aluno de doutorado que me acompanhou durante o projeto - sem a sua expertise e paciência, a conclusão deste

trabalho não teria sido possível. Por fim, agradeço ao Instituto de Física e ao grupo de Fluidos Complexos pela infraestrutura disponibilizada.

REFERÊNCIAS

- Bernstein, F. C. et al. (1977). “The Protein Data Bank: a computer-based archival file for macromolecular structures”. Em: *Journal of Molecular Biology* 112.3, pp. 535–542. DOI: 10.1016/S0022-2836(77)80200-3.
- Debye, P. (1915). “X-ray dispersal”. Em: *Annalen der Physik* 46.6, pp. 809–823.
- Feigin, L. e D. Svergun (1987). *Structure Analysis by Small-Angle X-Ray and Neutron Scattering*. New York: Plenum Press.
- Glatter, O. (1972). “X-Ray Small-Angle Scattering of Molecules Composed of Subunits”. Em: *Acta Physica Austriaca* 36.4, pp. 307–315.
- (1980). “Computation of distance distribution functions and scattering functions of models for small angle scattering experiments”. Em: *Acta Physica Austriaca* 52, pp. 243–256.
- ((1979)). “The Interpretation of Real-Space Information from Small-Angle Scattering Experiments”. Em: *Journal of Applied Crystallography* 12, pp. 166–175.
- Guinier, A. e G. Fournet (1955). *Small-Angle Scattering of X-rays*. New York: Wiley.
- Kratky, O. (1963). “Progress in Biophysics”. Em: *Progress in Biophysics* 13, pp. 105–173.
- Lindner, P. e Th. Zemb, ed. (1991). *Neutron, X-Ray and Light Scattering*. Elsevier Science Publishers B.V., pp. 33–78.
- Londoño, O. M. et al. (2018). “Small-Angle X-Ray Scattering to Analyze the Morphological Properties of Nanoparticulated Systems”. Em: *Handbook of Materials Characterization*. Ed. por S. Sharma. Cham: Springer. DOI: 10.1007/978-3-319-92955-2_2.
- Mittelbach, P. (1964). Em: *Acta Physica Austriaca* 19, pp. 53–102.
- Oliveira, C. L. P. (2001). “Simulação do Espalhamento de Raios X por Macromoléculas em Solução Através da Construção de Modelos Tridimensionais de Baixa Resolução”. Dissertação de Mestrado. Brazil: Universidade Estadual de Campinas.
- (2011). “Investigating Macromolecular Complexes in Solution by Small Angle X-Ray Scattering”. Em: *Current Trends in X-Ray Crystallography*. Ed. por D. A. Chandrasekaran. InTech, pp. 367–392.
- Oliveira, C. L. P. et al. (2009). “A SAXS Study of Glucagon Fibrillation”. Em: *Journal of Molecular Biology* 387.1, pp. 147–161. DOI: 10.1016/j.jmb.2009.01.049.
- Porod, G. (1948). Em: *Acta Physica Austriaca* 2, pp. 255–292.

VI. APÊNDICE

Segue neste apêndice o conjunto de apresentações realizadas em eventos científicos referentes a este projeto. Todos os trabalhos aqui citados estarão em anexo a este relatório junto aos seus respectivos certificados de participação.

II Brazilian Workshop on Soft Matter Trabalho apresentado no evento científico no 2º encontro de matéria mole no Instituto Principia, São Paulo, Brasil em formato de apresentação de pôster entre os dias 7 e 11 de abril.

EOSBF 2025 Trabalho apresentado no evento científico Encontro de Outono da Sociedade Brasileira de Física 2025 (EOSBF) em Belém-Pa entre os dias 18 e 23 de maio de 2025 em formato de apresentação de pôster.

SIICUSP 2025 Está programado para que o trabalho seja apresentado no 33º Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da Universidade de São Paulo (SIICUSP) entre os dias 20 a 21 de outubro de 2025 em formato apresentação oral.