

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**METODOLOGIA PARA A OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE  
TRANSPORTE DE BOLTZMANN CONSIDERANDO ESPALHAMENTO  
COMPTON SIMULADO POR KLEIN-NISHINA**

por

Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Agosto de 2007

**METODOLOGIA PARA A OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE  
TRANSPORTE DE BOLTZMANN CONSIDERANDO ESPALHAMENTO  
COMPTON SIMULADO POR KLEIN-NISHINA**

por

Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientadores: Prof. Dr. Volnei Borges

Prof. Dr. Carlos Malamut

Aprovada por:

Prof. Dr. Jorge Rodolfo Zabadal (PROMEC/UFRGS)

Prof<sup>a</sup>. Dra. Gabriela Hoff (Faculdade de Física/PUCRS)

Prof. Dr. Cláudio de Oliveira Graça (Departamento de Física/UFSM)

Prof. Dr. Ricardo Barros (IPRJ/UERJ)

Prof. Dr. Flávio José Lorini  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 22 de Junho de 2007

## AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a todos que, de alguma maneira, e a seu tempo, contribuíram para a elaboração da presente tese.

Agradeço a minha mãe Sônia e ao meu esposo Hugo, que sempre me apoiaram e serviram de ponto de apoio nos momentos mais difíceis.

Ao meu orientador, Professor Marco Túlio de Vilhena, pela competente orientação e pelo encaminhamento às pessoas certas, no momento certo.

Ao meu co-orientador Professor Volnei Borges e à Professora Gabriela Hoff pelos inestimáveis conselhos oferecidos, pela paciência demonstrada, sempre dispostos a auxiliar e pelas sugestões que foram decisivas para a finalização deste trabalho.

A todos os colegas do PROMEC.

Ao CNPQ pelo suporte financeiro e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFRGS (PROMEC) representado em seu corpo de funcionários e docentes.

22 de Agosto de 2007

## RESUMO

### METODOLOGIA PARA A OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN CONSIDERANDO ESPALHAMENTO COMPTON SIMULADO POR KLEIN-NISHINA

Nesse trabalho é apresentada uma solução analítica para a equação de transporte bidimensional em um domínio retangular considerando o espalhamento Compton, utilizando o método  $LTS_N$  e a aproximação  $P_N$  na variável angular. Esse procedimento leva a uma formulação para a taxa de dose total devido à radiação gama. Nessa derivação, a energia depositada pelo elétron livre é considerada. Para alcançarmos esse objetivo dois problemas são resolvidos: o primeiro para o transporte de fótons, assumindo como seção de choque diferencial o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo em energia; e o segundo para o transporte de elétrons livres, considerando a seção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford. Simulações numéricas e validações com os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo são apresentadas para ambos os problemas.

## **ABSTRACT**

METHODOLOGY FOR OBTAINING ANALYTIC SOLUTION FOR THE BOLTZMANN TRANSPORT EQUATION CONSIDERING COMPTON SCATTERING SIMULATED BY KLEIN-NISHINA

In this work we present the analytical solution for the two-dimensional transport equation in a rectangle considering Compton scattering, using the  $LTS_N$  method and the  $P_N$  approach for the angular variable. This procedure leads to a formulation for the total dosis due the gamma radiation. In this derivation, the energy deposited by the free electron is taken into account. To reach this objective we solve two model problems: the first one for the transport of photons, assuming the Klein-Nishina scattering kernel as the scattering differential cross section as well as the multigroup model in the energy variable; and the second one the transport of free electrons considering the screened Rutherford scattering kernel. Numerical simulations and validations with Monte Carlo results are reported for both problems.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA</b> .....	<b>7</b>
2.1	Uma Revisão da Solução $LTS_N$ para a Equação de Transporte de Fótons ....	7
2.1.1	Cálculo da Integral em $\lambda$ pela Quadratura de Gauss .....	10
2.1.2	Cálculo da Integral em $\lambda$ pela Regra de Simpson .....	12
2.1.3	Aplicação do Método $LTS_N$ .....	14
<b>3</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS PARA O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE FÓTONS EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL</b> .....	<b>20</b>
3.1	Uma Aplicação ao Cálculo do Fator de Build-up de Exposição .....	20
<b>4</b>	<b>SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN EM DUAS DIMENSÕES PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA</b> .....	<b>24</b>
4.1	O Método $LTS_N$ Nodal Bidimensional .....	24
4.2	Método $LTS_N$ Nodal Utilizando Aproximação Exponencial .....	26
4.3	Cálculo da Taxa de Dose Absorvida .....	33
<b>5</b>	<b>SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN EM DUAS DIMENSÕES PARA ELÉTRONS</b> .....	<b>35</b>
5.1	Introdução .....	35
5.2	Formulação .....	36
5.2.1	Aproximação multigrupo .....	38
5.2.2	Aproximação de Fokker-Planck .....	39
5.3	Determinação da Dose Absorvida .....	43

<b>6</b>	<b>RESULTADOS NUMÉRICOS PARA PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS</b>	<b>45</b>
6.1	Obtenção de uma Expressão para o Cálculo de Dose .....	45
6.2	Problema-teste .....	46
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES</b> .....	<b>53</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>55</b>
	<b>APÊNDICES</b> .....	<b>64</b>
<b>I</b>	<b>OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA</b> .....	<b>64</b>
<b>II</b>	<b>TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO</b> .....	<b>69</b>

# LISTA DE SÍMBOLOS

## 1. Caracteres Arábicos

$A$ :	massa atômica.
$A_j(s)$ :	matriz do $LTS_N$ para a energia $j$ .
$A_j^{-1}(s)$ :	inversa da matriz $A_j(s)$ .
$A_{jnx}$ :	matriz do sistema gerado pela formulação $LTS_N$ nodal para a energia $j$ .
$a_H$ :	raio de Bohr.
$B_e(x)$ :	fator de build-up de exposição.
$B_{jny}$ :	matriz do sistema gerado pela formulação $LTS_N$ nodal para a energia $j$ .
$c$ :	velocidade da luz.
$D$ :	dose absorvida.
$\mathbb{D}$ :	matriz que contém os autovalores da matriz $B_{jny}$ .
$\dot{D}$ :	taxa de dose absorvida.
$\dot{D}(r, E)$ :	taxa de dose devido ao feixe de elétrons.
$dv$ :	elemento infinitesimal de volume.
$d\theta^2/dz$ :	poder de espalhamento angular linear.
$e$ :	carga do elétron.
$E$ :	energia do fóton depois da colisão dada em MeV.
$E_0$ :	energia do fóton antes da colisão dada em MeV.
$E_s$ :	energia de ligação do elétron ao átomo.
$F_{KN}$ :	fator Klein-Nishina.
$F(\theta_x, x, z)$ :	função distribuição de probabilidade para o espalhamento de partículas penetrando no meio inicialmente na direção $z$ .
$h$ :	constante de Planck.
$I$ :	energia de excitação média.
$I(x, \lambda, \mu)$ :	intensidade do fluxo angular na direção $\mu$ , posição $x$ para o comprimento de onda $\lambda$ .
$I_j(x, \mu_n)$ :	intensidade do fluxo angular na direção $\mu_n$ , posição $x$ para o grupo de energia $j$ .



$I_{jn}(x)$ :	vetor componente espacial da expansão da intensidade do fluxo angular na posição $x$ para a energia $j$ na direção $n$ .
$I_{jn}(0)$ :	vetor componente espacial da expansão da intensidade do fluxo angular na posição $x = 0$ para a energia $j$ .
$\overline{I_{jn}}(0)$ :	vetor componente espacial transformado da expansão da intensidade do fluxo angular para a energia $j$ na direção $n$ .
$I_{jnx}(x)$ :	intensidade do fluxo angular médio na variável $x$ na direção discreta $\Omega_n$ .
$I_{jny}(y)$ :	intensidade do fluxo angular médio na variável $y$ na direção discreta $\Omega_n$ .
$k(\lambda', \lambda)$ :	seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina.
$L$ :	espessura da placa.
$\mathfrak{L}^{-1}$ :	transformada inversa de Laplace.
$mv$ :	momento do fóton.
$m_e v$ :	momento do elétron.
$m_e$ :	massa do elétron.
$M$ :	número de energias considerado.
$M_A$ :	massa molar da substância $A$ .
$N$ :	ordem da quadratura angular.
$N_A$ :	número de Avogadro.
$\mathcal{N}$ :	cardinalidade do conjunto de ordenadas discretas.
$p$ :	momento do elétron.
$r_e$ :	raio clássico do elétron.
$s_k$ :	raízes do polinômio característico da matriz $A_j(s)$ .
$S$ :	poder de freamento total - stopping power.
$S/\rho$ :	poder de freamento relacionado à massa - mass stopping power.
$S_{col}$ :	poder de freamento de colisão - collision stopping power.
$S_{rad}$ :	poder de freamento radioativo - radiative stopping power.
$v$ :	velocidade do elétron.
$\mathbb{X}$ :	a matriz dos autovetores da matriz $B_{jny}$ .
$Z$ :	número atômico.
$Z_{j-1}(x)$ :	termo de espalhamento para a energia $j - 1$ .

## 1. Caracteres Gregos

$\delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')$ :	função generalizada Delta de Dirac.
$\alpha$ :	constante dependente do meio.
$\beta_k$ :	matriz dos coeficientes da decomposição em frações parciais.
$\Delta_\Omega$ :	Laplaciano para a aproximação de Fokker-Planck.
$\eta_*$ :	constante do núcleo de espalhamento de Rutherford.
$\lambda$ :	comprimento de onda do fóton espalhado.
$\lambda'$ :	comprimento de onda do fóton incidente.
$\Lambda$ :	constante de decaimento.
$\bar{\lambda}$ :	livre caminho médio.
$\bar{\lambda}_{tr}$ :	livre caminho médio de transporte.
$\mu_0$ :	cosseno do ângulo de espalhamento.
$\mu_{a_i}/\rho$ :	coeficiente de absorção de meio material.
$\bar{\mu}_0$ :	ângulo médio de espalhamento.
$\mu_l(\lambda)$ :	coeficiente de atenuação linear para o comprimento de onda $\lambda$ .
$\mu_{lj}$ :	coeficiente de atenuação linear para o grupo de energia $j$ .
$\nu$ :	freqüência da radiação eletromagnética.
$\omega_i$ :	pesos da quadratura de Gauss.
$\bar{\Omega}$ :	vetor ângulo sólido da partícula espalhada.
$\bar{\Omega}'$ :	vetor ângulo sólido da partícula incidente.
$\Omega_n = (\mu_n, \eta_n)$ :	direção discreta.
$\psi(x, y, \bar{\Omega}, E)$ :	fluxo escalar de elétrons na direção $\bar{\Omega}$ com energia $E$ .
$\psi(x, y, \mu, E)$ :	fluxo angular de elétrons.
$\psi^{FP}(x, y, z, \bar{\Omega})$ :	fluxo angular aproximado por Fokker-Planck na direção $\bar{\Omega}$ .
$\bar{\psi}_n^{FP}(s, y, E)$ :	fluxo angular aproximado por Fokker-Planck transformado por Laplace na variável $x$ para a direção $\Omega_n$ .
$\rho$ :	densidade do material.
$\sigma(\lambda', \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')$ :	núcleo de espalhamento.
$\sigma_s(E \rightarrow E', \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')$ :	seção de choque de espalhamento diferencial.
$\sigma_a$ :	seção de choque de absorção.

$\sigma_t$ :	seção de choque total.
$\sigma_{tr}$ :	seção de choque de transporte.
$\theta$ :	ângulo de deflexão do fóton.

## ÍNDICE DE FIGURAS

2.1 Geometria unidimensional heterogênea .....	19
--	----

## ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Simulação numérica para o fator build-up de exposição num meio heterogêneo formado por Água 1.0 mfp + Chumbo .....	21
3.2	Convergência numérica do método $LTS_N$ .....	22
3.3	Simulação numérica para o fator build-up de exposição num meio heterogêneo formado por Água 1.0 mfp + Ferro .....	23
6.1	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por água .....	48
6.2	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por tecido mole (ICRU44) .....	48
6.3	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por osso (ICRU44) .....	50
6.4	Convergência numérica da aproximação $P_N$ para um retângulo 20 cm x 20 cm homogêneo composto por água .....	50
6.5	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] num retângulo homogêneo composto por água .....	51
6.6	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] num retângulo homogêneo composto por tecido mole (ICRU44) .....	51
6.7	Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] num retângulo homogêneo composto por osso (ICRU44) .....	51
6.8	Convergência numérica do método $LTS_N$ nodal para um retângulo 20 cm x 20 cm homogêneo composto por água .....	52
6.9	Tempo de execução computacional para a aproximação $P_N$ .....	52
6.10	Tempo de execução computacional para o método $LTS_N$ nodal .....	52

II.1	Coeficientes de atenuação [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1 MeV. ....	69
II.2	Coeficientes de atenuação [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV. ....	70
II.3	Coeficientes de absorção [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV. ....	70
II.4	Pode de Parada de Colisão [ $\text{MeV cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV. ....	71
II.5	Dados dos meios materiais considerados. ....	71

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

Logo depois de descobertos por Whilhelm C. Roentgen, os raios-X começaram a ser utilizados em diagnóstico e terapêutica, tendo Emil A. Grubbe como um pioneiro, ainda em 1896. Nesse mesmo ano, Pierre e Marie Curie descobriram o Radium- 226. Nesta época, os cirurgiões passaram a utilizar as radiações no tratamento de tumores malignos, acreditando atuarem por ação cáustica nos tecidos. A falta de conhecimentos técnicos e científicos levou ao aparecimento de inúmeras e graves complicações levando as aplicações terapêuticas ao descrédito.

Inicialmente as doses eram avaliadas pelas reações induzidas na pele e a unidade correspondente foi denominada “dose eritema”. A dose administrada era avaliada segundo a intensidade do eritema. A avaliação era, no entanto, subjetiva e feita após o tratamento.

Os progressos da física médica na década de 30 permitiram quantificar as doses de radiação e estabelecer uma relação entre quantidade e efeito biológico. Em 1944, Strandqvist publicou os resultados de observações clínicas que relacionavam o efeito das radiações sobre os tecidos e da dose com o tempo de administração e a distribuição dessa no tempo.

O desenvolvimento da física e da engenharia nuclear proporcionaram um grande avanço na produção de materiais radioativos obtidos artificialmente, propiciando novas fontes (entre elas o Cobalto-60) com diferentes características para uso em terapias. Esses avanços na área da física, associados a uma melhor compreensão dos mecanismos bioquímicos da interação da radiação com a matéria, trouxeram as bases teóricas para tratamentos que concentram grandes doses de radiação em um determinado volume alvo, protegendo os tecidos normais e lesando ao máximo os tumorais.

O desenvolvimento na engenharia de construção de aceleradores de partículas, que passaram a ser construídos em tamanhos apropriados para uso clínico com grande variedade

de energias, representou um aumento significativo de opções de tratamento, cada vez melhores e mais otimizados.

As radiações ionizantes podem atravessar a matéria ou serem absorvidas por ela, o que possibilita diversas aplicações. Mesmo em minúsculas quantidades, cuja detecção seja muito árdua pelos métodos químicos, a radiação emitida pode ser detectada. Pela absorção da energia das radiações, células ou microrganismos, podem ser destruídos. Essa característica, é muito útil quando empregada para destruir células tumorais, reduzir ou exterminar colônias de bactérias ou microrganismos nocivos.

Os radioisótopos são utilizados na medicina nuclear tanto em diagnósticos como em terapias. Hoje, uma das mais importantes aplicações das radiações ionizantes é a radioterapia.

Radioterapia significa tratamento com radiação em seu sentido mais amplo, na verdade, aplica-se esse nome a uma especialidade médica, que se ocupa do tratamento de determinadas doenças, fundamentalmente oncológicas, por meio de radiações ionizantes. A radioterapia é um procedimento que compete em igualdade de condições com a quimioterapia, a cirurgia e a imunologia no tratamento de tumores malignos. De fato, esses procedimentos, em vários casos, se complementam.

As radiações ionizantes destroem as células tumorais, mas também podem destruir as células saudáveis. A meta da radioterapia é levar a máxima dose de radiação possível a células tumorais, com um mínimo de dose aos tecidos saudáveis que estão em volta. Isto requer uma boa compreensão teórica dos processos de interação das radiações com a matéria viva, da resposta dessa às radiações ionizantes e da distribuição do fluxo de radiação em diferentes meios, o que nos leva a determinação de parâmetros e grandezas fundamentais para as áreas de proteção radiológica e terapêutica.

Uma das formas de obter-se o fluxo das radiações é através da equação de transporte de Boltzmann para partículas e fótons. A equação de transporte de Boltzmann modela matematicamente problemas de distribuição de partículas em meios materiais, com origem na teoria cinética dos gases [Lewis e Miller, 1984], [Bell e Glastone, 1985], e representa um balanço de partículas num elemento de volume do espaço de fase.

A equação de transporte constitui-se numa ferramenta matemática fundamental para o estudo quantitativo de vários fenômenos físicos associados às radiações. Na área



de proteção radiológica essa equação é aplicada, principalmente, no cálculo e análise de blindagens e na dosimetria das radiações.

Decorrente da enorme aplicabilidade da teoria de transporte em diversas áreas das engenharias e da física, surge o interesse no desenvolvimento de técnicas computacionais eficientes de solução dessa equação. Para modelagem de problemas de transporte de partículas existem duas abordagens bem definidas. Os métodos de modelagem computacional probabilística (métodos de Monte Carlo) visam a estimar a solução tratando diretamente o problema físico. Nos últimos anos, um grande número de códigos de Monte Carlo vem sendo desenvolvido para calcular as interações da radiação com a matéria. Entre eles, podemos destacar o EGS4 (“Electron Gama Shower”, versão 4), que simula a interação de partículas com a matéria em um grande alcance de energia. Recentemente, uma atenção especial vem sendo dada ao código Geant4 [Agostinelli et. al], [Allison et al]. Geant4 é um código de simulação Monte Carlo desenvolvido pela CERN (“European Organization for Nuclear Research”) com o objetivo de descrever a física de partículas. Na abordagem determinística, modelos matemáticos aproximados são usados para representarem a equação de transporte, uma vez que soluções exatas para essa equação só podem ser obtidas, para problemas específicos, por exemplo, pelo método de Case [Case, 1960], [Case e Zweifel, 1967] e pela técnica de “Wiener-Hopf”. Dentre os métodos de cálculos determinísticos destacam-se os métodos baseados nas aproximações  $P_N$  (expansão em harmônicos esféricos) e  $S_N$  (método das ordenadas discretas). Na formulação  $P_N$ , os fluxos angulares são expandidos em termos das funções de Legendre nas variáveis angulares, e substituídos na equação de transporte, resultando um sistema de equações que é resolvido para os coeficientes da expansão. Na formulação  $S_N$ , assume-se que as partículas sofrem espalhamento segundo um número finito de direções.

Dentre os métodos numéricos de discretização espacial das equações  $S_N$  em geometria multidimensional cartesiana, destacam-se os métodos espectro-nodais SGF-CN [Barros e Larsen, 1992] e SGF-ExpN [Barros e Larsen, 1991], [Mello, 2000], [Barros e Mello, 2002] que possibilitam a obtenção de resultados precisos sem que se faça necessária a utilização de malhas finas na discretização espacial do domínio. O método SGF-CN considera os fluxos angulares constantes ao longo dos contornos dos nodos espaciais, enquanto que no método SGF-ExpN são utilizadas funções exponenciais para aproximar os fluxos angulares ao longo

dos contornos dos nodos espaciais.

Na última década, surgiu na literatura, o método  $LTS_N$  que resolve, analiticamente, a equação de ordenadas discretas ( $S_N$ ) em uma placa plana pela técnica da transformada de Laplace. A idéia principal desse método compreende dois passos: a aplicação da técnica da transformada de Laplace na variável espacial do conjunto de equações  $S_N$ , solução da equação algébrica resultante do processo da diagonalização da matriz, e a inversão dos fluxos angulares transformados pelo uso da teoria da transformada de Laplace. Aqui, solução analítica significa que nenhuma aproximação é feita ao longo do processo de derivação da solução. Antes disso, a transformada de Laplace vinha sendo aplicada, na solução da equação de transporte, na variável tempo [Kuscer e Zweifel, 1965], [Ito, 1972]. Desde então, essa metodologia vem sendo aplicada a vários problemas de transferência radiativa e de transporte de partículas, entre eles podemos citar: [Vilhena e Barichello, 1991], [Barichello and Vilhena, 1993], [Vilhena e Barichello, 1995], [Vilhena e Segatto, 1996], [Brancher et al, 1999], [Vilhena e Barichello, 1999], [Batistela et al, 1997], [Borges e Derivi, 2001], [Rodriguez et al, 2006], [Velho et al., 2003], [Vasques et al., 2003], [Larsen et al., 2005].

A partir da abordagem do método  $LTS_N$  derivou-se um método genérico [Cardona, 1996] [Vilhena et al, 1998], onde prevalece o caráter analítico da solução para as aproximações que transformam a equação de transporte num conjunto de equações diferenciais ordinárias. Essas versões são conhecidas como  $LTP_N$  [Vilhena e Streck, 1992] [Streck, 1993],  $LTW_N$  [Cardona e Vilhena, 1993] [Cardona e Vilhena, 1994a],  $LTCh_N$  [Cardona e Vilhena, 1994b] [Cardona, 1996],  $LTA_N$  [Cardona e Vilhena, 1995] [Cardona e Vilhena, 1997] e  $LTLD_N$  [Barros et. al, 1996].

Por outro lado, recentemente uma atenção especial vem sendo dada à aplicação do método  $LTS_N$  na solução das equações  $S_N$  nodais multidimensionais. De fato, diversos trabalhos sobre esse assunto estão disponíveis na literatura. Entre eles podemos citar os trabalhos de Zabadal [Zabadal et al, 1995] [Zabadal et al, 1997], Pazos [Pazos et al, 2003] e Hauser [Hauser, 2002]. Cumpre ressaltar que os trabalhos citados consideram um grupo de energia e espalhamento isotrópico. Em nosso conhecimento, essa metodologia ainda não foi aplicada na solução da equação de transporte assumindo o kernel de espalhamento de Klein-Nishina e modelo multigupo. Portanto, neste trabalho, com o objetivo de aumentar a abrangência do método, é apresentada uma nova aplicação do método  $LTS_N$  nodal:

considerando o espalhamento Compton, simulado pela seção de choque de espalhamento diferencial de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo, resolvemos a equação de transporte de fótons em um retângulo. A principal idéia está na solução das duas equações  $S_N$  unidimensionais, resultantes das integrações transversas das equações  $S_N$  no retângulo, pelo bem conhecido método  $LTS_N$  [Rodriguez et al, 2006]. Uma vez aproximados por exponenciais, os termos de fuga transversal, que surgem nas equações  $S_N$  integradas transversalmente, nos é possível determinar uma solução analítica para a equação de transporte de fótons.

Os fótons ao interagirem com o meio material depositam a energia na forma, principalmente, dos efeitos fotoelétrico e espalhamento Compton. No efeito Compton, além da radiação espalhada, de menor energia, o elétron emerge com energia cinética que depende do ângulo de espalhamento. A energia depositada por esses elétrons devem ser consideradas no cálculo de dose, e, no presente trabalho, essa consideração será feita mediante o tratamento devido a seção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford. Sendo assim, dentro da área de radioterapia e proteção radiológica, neste trabalho, propomos uma formulação de um método analítico para a solução da equação de transporte bidimensional em um retângulo, considerando o espalhamento Compton, e a obtenção de uma expressão para o cálculo de dose total devido à radiação gama. Para tal, dois problemas são resolvidos: o primeiro, para o transporte de fótons, considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo em energia. E o segundo, para o transporte de elétrons livres, assumindo a seção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford. Os problemas são acoplados pela energia.

Visando a cumprir o objetivo proposto, o conteúdo desse trabalho está organizado em sete capítulos. O capítulo 2, tem o caráter de informar os procedimentos necessários à obtenção da solução, pelo conhecido método  $LTS_N$ , da equação de transporte de fótons em uma placa plana, considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e modelo multigrupo em energia. Simulações numéricas para o problema de transporte de fótons em uma dimensão e comparações com resultados disponíveis na literatura são apresentadas no capítulo 3. No capítulo 4 apresentamos a equação de transporte para fótons em um retângulo, assumindo modelo multigrupo e seção de choque de espalhamento diferencial de Klein-Nishina, bem como sua solução pelo método  $LTS_N$  nodal bidimensional. No capítulo 5, desenvolvemos uma solução para a equação de transporte de elétrons em duas dimensões,

bem como a definição de algumas quantidades e procedimentos que permitem determinar a quantidade de energia depositada pelos elétrons. Simulações numéricas e comparações com os resultados obtidos pela técnica de Monte Carlo são apresentadas no capítulo 6, comprovando a eficiência desejada, para a validação da metodologia desenvolvida. E finalmente, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões do presente trabalho e as sugestões para trabalhos futuros. O Apêndice I contém uma dedução da equação de transporte para fótons e radiação gama. No Apêndice II é apresentada uma introdução à questão do câncer juntamente com alguns termos relacionados com a radioterapia. No Apêndice III são introduzidos alguns fundamentos da interação de fótons e elétrons com a matéria. Aproximações utilizadas para resolver a equação de transporte para partículas carregadas e tabelas com os dados utilizados compõem, respectivamente, os Apêndices IV e V deste trabalho.

## CAPÍTULO 2

### A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA

#### 2.1 Uma Revisão da Solução $LTS_N$ para a Equação de Transporte de Fótons

Consideremos a equação de transporte dependente da energia, escrita em termos do comprimento de onda do fóton,  $\lambda$ , independente do tempo, sem fonte externa [Lunelli, 2002], [Sauer, 1997], [Trindade, 1997], dada por,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \mu_l(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_0^\lambda d\lambda' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' I(x, \lambda', \mu') \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}'), \quad (2.1)$$

com intensidade de fluxo angular  $I(x, \lambda, \mu)$  conhecida nas fronteiras. Aqui,  $\mu_l(\lambda)$  representa o coeficiente de atenuação linear e o núcleo de espalhamento é aproximado por uma série finita em termos de polinômios de Legendre,

$$\sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0), \quad (2.2)$$

onde  $\mu_0 = \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}$  é o cosseno do ângulo de espalhamento.

Reescrevendo a equação (2.1), temos,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \mu_l(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_0^\lambda d\lambda' \int_{4\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) \times \\ \times I(x, \lambda', \mu') d\bar{\Omega}'. \quad (2.3)$$

Usamos, então, o teorema da adição dos polinômios de Legendre,

$$P_l(\mu_0) = P_l(\mu)P_l(\mu') + \underbrace{\text{termos contendo } \cos m(\varphi - \varphi')}_{\text{desconsidera-se, pois } \varphi \text{ é muito pequeno (simetria azimutal)}} \quad (2.4)$$

obtendo, no lado direito da equação (2.3),

$$\begin{aligned} & \int_0^\lambda d\lambda' \int_{4\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\bar{\Omega}' = \\ & = \int_0^\lambda d\lambda' \int_{-1}^1 \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sigma_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Substituindo o resultado encontrado em (2.5), na equação (2.3), a equação para a intensidade de fluxo angular resulta em

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \bar{\Omega}) + \mu_l(\lambda) I(x, \lambda, \bar{\Omega}) = \\ & = \int_0^\lambda d\lambda' \int_{-1}^1 \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sigma_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (2.6)$$

O núcleo de espalhamento contido na equação (2.1) pode ser escrito como,

$$\sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') = \frac{\lambda}{\lambda'} k(\lambda' \rightarrow \lambda; \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}'), \quad (2.7)$$

onde  $k(\lambda' \rightarrow \lambda; \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}')$  representa a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina para o espalhamento Compton e é dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} & k(\lambda' \rightarrow \lambda; \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left( \frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \times \\ & \times \left[ \frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}'), \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde  $N_A$  representa o número de Avogadro ( $6.02 \times 10^{23}$ /mol),  $Z$ , o número atômico,  $A$ , a massa atômica,  $\rho$ , a densidade do meio,  $\delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')$ , a função generalizada Delta de Dirac e  $\sigma_T$ , a seção de choque de Thomson, escrita como,

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 = 6.65245 \times 10^{-25} \text{cm}^2, \quad (2.9)$$

e  $\alpha$  uma constante dependente do meio determinada por,

$$\alpha = \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T. \quad (2.10)$$

Desta forma, o núcleo de espalhamento em (2.3) é tal que,

$$\sigma_l(\lambda', \lambda) = \frac{3}{8} \alpha \frac{\lambda'}{\lambda} \left( \frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} - \sin^2 \theta \right) P_l(1 + \lambda' - \lambda), \quad (2.11)$$

ou ainda,

$$\sigma_l(\lambda', \lambda) = \alpha k(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda), \quad (2.12)$$

onde

$$k(\lambda', \lambda) = \begin{cases} \frac{3}{8} \frac{\lambda'}{\lambda} \left[ \frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} + 2(\lambda' - \lambda) + (\lambda' - \lambda)^2 \right] & (\lambda' < \lambda < \lambda' + 2) \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases} \quad (2.13)$$

Finalmente, substituindo a equação (2.12) na equação (2.3) obtemos,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \mu_l(\lambda) I(x, \lambda, \mu) \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha k(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Neste trabalho, é mais conveniente usar, ao invés de considerar energia variável, o comprimento de onda do fóton em unidades de Compton,

$$\lambda_0 = \frac{0,511}{E_0[\text{MeV}]}, \quad (2.15)$$

onde  $E_0$  é a energia do fóton incidente no meio dada em MeV. O aumento no comprimento de onda associado com o espalhamento Compton é dado pela equação,

$$\lambda - \lambda' = (1 - \cos \theta). \quad (2.16)$$

O valor máximo do comprimento de onda é 2 unidades de Compton, e ocorre quando o fóton sofre um desvio de  $180^\circ$ . A integral em  $\lambda$ , na equação (2.14), é calculada desde o limite máximo de energia para o fóton,  $\lambda_0$ , até o limite mínimo de energia,  $\lambda_0 + 2$ .

Neste ponto, propomos a aproximação do termo integral em  $\lambda$ , que aparece na equação (2.14), resultando em soluções para cada valor de energia. Assim sendo, apresentamos a seguir, a quadratura de Gauss e a regra de Simpson para o tratamento da integral em questão.

### 2.1.1 Cálculo da Integral em $\lambda$ pela Quadratura de Gauss

Numa abordagem diferenciada, aproximamos o termo integral em  $\lambda$ , contido na equação (2.14), por Quadratura de Gauss. A fórmula de integração de Gauss-Legendre é dada por,

$$\int_{-1}^1 F(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i F(x_i), \quad (2.17)$$

onde as abscissas  $x_i$  são as raízes do polinômio de Legendre  $P_n(x)$ , de grau  $n$ , no intervalo  $[-1, 1]$  e os pesos são obtidos por,

$$\omega_i = \frac{-2}{(n+1)P'_n(x_i)P'_{n+1}(x_i)}, i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.18)$$

Assim, fazendo a seguinte mudança de variável,



$$\lambda_* = \lambda - \lambda_0 - 1, \quad (2.19)$$

e, conseqüentemente,  $d\lambda_* = d\lambda$ , de forma que a integral contida na equação (2.14) pode ser aproximada por,

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha k(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda, \mu) d\mu' d\lambda' = \\ & = \int_{-1}^1 \alpha k(\lambda'_*, \lambda_*) P_l(1 + \lambda'_* - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_*, \mu') d\mu' d\lambda'_* \end{aligned} \quad (2.20)$$

e, de acordo com a fórmula (2.17), temos,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \alpha k(\lambda'_*, \lambda_*) P_l(1 + \lambda'_* - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_*, \mu') d\mu' d\lambda'_* \\ & = \sum_{r=1}^M \alpha k(\lambda_{*r}, \lambda_*) P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_*) P_l(\mu) \omega_r \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_{*r}, \mu') d\mu', \end{aligned} \quad (2.21)$$

ou,

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha k(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda, \mu) d\mu' d\lambda' = \\ & = \sum_{r=1}^M \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') \omega_r d\mu', \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde os índices  $r$  e  $j$  correspondem respectivamente, à energia do fóton antes e depois do espalhamento,  $\lambda_* = \lambda - \lambda_0 - 1$ , são as raízes da quadratura de Gauss,  $k(\lambda_{*r}, \lambda_{*j}) = k_{rj}$  e  $I(x, \lambda_{*r}, \mu') = I_r(x, \mu')$ .

Desta forma, a equação (2.14) pode ser escrita como,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \mu_{lj} I_j(x, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') \omega_r d\mu'. \quad (2.23)$$

A integral restante na equação (2.23) pode ser então aproximada novamente por

quadratura de Gauss (2.17), ou seja,

$$\int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') d\mu' = \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) I_r(x, \mu_i) w_i. \quad (2.24)$$

Reescrevendo a equação (2.23), utilizando o resultado obtido em (2.24), temos a aproximação em ordenadas discretas,

$$\mu_n \frac{d}{dx} I_j(x, \mu_n) + \mu_{lj} I_j(x, \mu_n) = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) I_r(x, \mu_i) w_i \omega_r, \quad (2.25)$$

ou ainda,

$$\mu_n \frac{d}{dx} I_{jn}(x) + \mu_{lj} I_{jn}(x) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) I_r(x, \mu_i) w_i \omega_r, \quad (2.26)$$

onde  $\omega_r$  são os pesos da quadratura de Gauss para a energia e  $w_i$  são os pesos da quadratura usada na variável angular.

### 2.1.2 Cálculo da Integral em $\lambda$ pela Regra de Simpson

Usando a fórmula da regra de Simpson dada por [Atkinson, 1988],

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{\Delta}{3} \left[ f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{j=1, j \text{ ímpar}}^{n-1} f(x_j) + 2 \sum_{j=2, j \text{ par}}^{n-2} f(x_j) \right], \quad (2.27)$$

onde  $n \in Z$  é um número (par) de subintervalos,

$$\Delta = \frac{b-a}{n} \quad (2.27a)$$

e,

$$x_r = a + r\Delta, r \in Z. \quad (2.27b)$$

para aproximar a integral em  $\lambda$ , contida na equação (2.14) podemos escrever,

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha k(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda, \mu) d\mu' d\lambda' = \\ & = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=1}^{m+1} c_r \alpha k(\lambda_r, \lambda) P_l(1 + \lambda_r - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_r, \mu') d\mu' d\lambda', \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde  $m$  é o número (par) de subintervalos do intervalo  $(\lambda_0, \lambda_0 + 2)$ , sendo  $M = m + 1$  o número de grupos de energias considerado; além disso,

$$\Delta = \frac{2}{m}, \quad (2.28a)$$

$$c_1 = c_{m+1}, \quad (2.28b)$$

$$c_r = \begin{cases} 4 & \text{se } r \text{ for par} \\ 2 & \text{se } r \text{ for ímpar} \end{cases} \quad (2.28c)$$

e,

$$\lambda_r = \lambda_0 + r\Delta, r \in Z. \quad (2.28d)$$

Assim para cada um dos valores discretos de energia, usando a notação simplificada  $k(\lambda_r, \lambda_j) = k_{rj}$  e  $I(x, \lambda_r, \mu') = I_r(x, \mu')$  e substituindo em (2.14) o resultado obtido em (2.28), temos,

$$\mu \frac{d}{dx} I_j(x, \mu) + \mu_{lj} I_j(x, \mu) = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') d\mu' \quad (2.29)$$

com  $j = 1, \dots, M$  ( $M = m + 1$ ,  $m$  número par de subintervalos do intervalo  $(\lambda_0, \lambda_0 + 2)$ ). Segundo o tratamento proposto à variável  $\lambda$ , o sistema resultante depende agora das variáveis  $x$  e  $\mu$ . Aproximamos, então, o termo integral na equação (2.29), por quadratura de Gauss. Assim, escrevemos

$$\mu_n \frac{d}{dx} I_j(x, \mu_n) + \mu_{lj} I_j(x, \mu_n) = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) I_r(x, \mu_i) \omega_i, \quad (2.30)$$

ou,

$$\mu_n \frac{d}{dx} I_{jn}(x) + \mu_{lj} I_{jn}(x) = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) I_{ri}(x) \omega_i, \quad (2.31)$$

onde  $\omega_i$  são os pesos da quadratura de Gauss.

### 2.1.3 Aplicação do Método $LTS_N$

As equações (2.26) e (2.31) são as aproximações  $S_N$  para a equação (2.14), com o cálculo da integral em  $\lambda$ , respectivamente, pela quadratura de Gauss e pela regra de Simpson. Nesse momento, aplicamos, então, o método  $LTS_N$  para a solução do sistema resultante. Assim sendo, a transformada de Laplace, na variável  $x$  aplicada à equação (2.26), resulta no sistema de equações algébricas representado por,

$$s \bar{I}_{jn}(s) + \frac{\mu_{lj}}{\mu_n} \bar{I}_{jn}(s) - \frac{1}{\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) \omega_i \omega_r \bar{I}_{ri}(s) = I_{jn}(0), \quad (2.32)$$

com  $j = 1, 2, \dots, M$  e  $n = 1, 2, \dots, N$ .

De forma análoga, aplicamos a transformada de Laplace, na variável  $x$ , na equação (2.31) e obtemos o sistema de equações algébricas dado por,

$$s\bar{I}_{jn}(s) + \frac{\mu_{lj}}{\mu_n} \bar{I}_{jn}(s) - \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1+\lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^N P_l(\mu_i) \omega_i \bar{I}_{ri}(s) = I_{jn}(0), \quad (2.33)$$

com  $j = 1, 2, \dots, M$  e  $n = 1, 2, \dots, N$ .

Devido à característica do núcleo de espalhamento,  $k_{ij} = 0$  se  $i > j$ , conforme (2.13), as equações (2.32) e (2.33) representam um conjunto de  $M$  sistemas de ordem  $N$ , cujas soluções representam a intensidade de fluxo angular para cada um dos  $M$  valores de energias considerados, calculados nas  $N$  direções discretas. Os sistemas podem ser representados matricialmente por,

$$A_j(s) \overline{I_{jn}(s)} = I_{jn}(0) + \overline{Z_{j-1}(s)}, \quad (2.34)$$

onde  $\overline{I_{jn}(s)}$  é o vetor de  $N$  componentes do fluxo angular transformado pela técnica de Laplace e  $I_{jn}(0)$  é o vetor de  $N$  componentes do fluxo angular em  $x = 0$ . Eles são escritos como:

$$\overline{I_{jn}(s)} = \left[ \overline{I_{j1}(s)} \quad \overline{I_{j2}(s)} \quad \dots \quad \overline{I_{jN}(s)} \right]^T, \quad (2.35)$$

$$I_{jn}(0) = \left[ I_{j1}(0) \quad I_{j2}(0) \quad \dots \quad I_{jN}(0) \right]^T. \quad (2.36)$$

Por outro lado, os elementos da matriz  $A_j(s)$ , ( $N \times N$ ) para cada valor de energia,  $j$ , têm, para o sistema dado por (2.32), a forma,

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\mu_{lj}}{\mu_p} - \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) w_j \omega_q & \text{sep} = q \\ -\frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) w_j \omega_q & \text{sep} \neq q \end{cases} \quad (2.37)$$

e,

$$\overline{Z_{j-1}(s)} = \sum_{i=1}^{j-1} H_i \overline{I_{in}(s)}. \quad (2.38)$$

O vetor  $\overline{Z_{j-1}(s)}$  representa o termo de espalhamento transformado, para a energia  $j - 1$ , sendo nulo para o primeiro valor de grupo de energia. As componentes da matriz constante  $H_i$  são dadas por,

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} n k_{ij} P_l(1 + \lambda_{*i} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) w_j \omega_q & sep = q \\ \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} n k_{ij} P_l(1 + \lambda_{*i} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) w_j \omega_q & sep \neq q. \end{cases} \quad (2.39)$$

Considerando que para a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina o comprimento de onda varia de  $\lambda_0$  à  $\lambda_0 + 2$  ( $\lambda_0$  é o comprimento de onda da radiação incidente na placa), discretizamos, sem perda de generalidade, esse intervalo em  $M$  subintervalos, quer dizer  $M$  grupos, sendo que o primeiro grupo (grupo 1) corresponde ao subintervalo com o menor comprimento de onda e maior energia e o grupo  $M$ , ao subintervalo de maior comprimento de onda e menor energia. Resolvemos recursivamente a equação (2.34), com  $j$  variando de 1 a  $M$ , devido ao retro-espalhamento e obtemos o seguinte resultado:

$$\overline{I_{jn}(s)} = [A_j(s)]^{-1} I_{jn}(0) + [A_j(s)]^{-1} \overline{Z_{j-1}(s)}. \quad (2.40)$$

A transformada inversa de Laplace, aplicada à equação (2.40) nos fornece a intensidade do fluxo angular, em função de  $x$ , para a energia  $j$ , na direção  $n$ , isto é,

$$I_{jn}(x) = \mathfrak{L}^{-1}\{[A_j(s)]^{-1} I_{jn}(0)\} + \mathfrak{L}^{-1}\{[A_j(s)]^{-1} \overline{Z_{j-1}(s)}\}. \quad (2.41)$$

Uma vez obtida a matriz inversa  $[A_j(s)]^{-1}$ , a transformada inversa do primeiro termo do segundo membro da equação (2.41), pode ser obtida através da técnica de expansão de Heaviside e para o segundo termo, usamos a propriedade da convolução ou também a técnica de expansão de Heaviside. Portanto, a intensidade do fluxo angular de energia será dada por

$$I_{jn}(x) = \sum_{k=1}^{NM} \beta_k e^{s_k x} I_{jn}(0) + Z_{j-1}(x) * \mathfrak{L}^{-1}\{A_j^{-1}(s)\}, \quad (2.42)$$

onde  $I_{jn}(x)$  é definido como

$$I_{jn}(x) = \begin{bmatrix} I_{j1}(x) & I_{j2}(x) & \dots & I_{jN}(x) \end{bmatrix}^T, \quad (2.42a)$$

sendo que  $I_{jn}(x)$  representa a intensidade de fluxo angular com direção  $\mu_n$  e grupo  $j$ ,  $\beta_k$ , a matriz  $(N \times N)$  para cada grupo de energia  $j$  dos coeficientes da decomposição em frações parciais da matriz  $A_{jn}(s)$ , é representada por

$$\beta_k = \frac{Adj(A_{jn}(s))}{\left. \frac{d}{ds} [det A_{jn}(s)] \right|_{s=s_k}}, \quad (2.42b)$$

onde  $s_k$  são as raízes do polinômio característico da matriz  $A_{jn}(s)$  e o termo de espalhamento é escrito como

$$Z_{j-1}(x) = H_i I_{j-1,n}(x) \quad (2.43)$$

com  $H_i$  de elementos dados por (2.39).

Uma dificuldade relacionada à solução proposta para o método  $LTS_N$  em (2.42) diz respeito ao inconveniente da mesma gerar erros de “overflow”, originados na avaliação de exponenciais com argumentos  $s_k$  positivos, no caso de buscar-se a solução para problemas de transporte envolvendo grandes espessuras. Tal situação era contornada discretizando-se o domínio e utilizando-se condições de continuidade nas interfaces. Hoje, pode ser superada efetuando-se uma mudança de base e apresentando-se a solução  $LTS_N$  como sendo,

$$I_{jn}(x) = \left( \sum_{k=1}^{MN} \beta_k e^{-s_k(a-x)} + \sum_{k=1}^{MN} \beta_k e^{s_k x} \right) I_{jn}^*(0) + Z_{j-1}(x) * \mathfrak{L}^{-1}\{A_j^{-1}(s)\}, \quad (2.44)$$

onde  $I_{jn}^*(0) = C(a)I_{jn}(0)$  é o vetor de  $N$  componentes, para cada grupo de energia  $j$ , que

representa as intensidades de fluxos angulares na nova base em  $x = 0$ , representado por,

$$I_{jn}^*(0) = \left[ I_{j1}^*(0) \quad I_{j2}^*(0) \quad \dots \quad I_{jN}^*(0) \right]^T, \quad (2.44a)$$

sendo  $I_{jn}^*(0)$  a componente da intensidade do fluxo angular modificado na direção  $\mu_n$  e grupo  $j$  em  $x = 0$  e  $C(a)$  é a matriz ( $N \times N$ ) para cada grupo de energia  $j$  escrita como

$$C(a) = \left( \sum_{k=1}^{MN} \beta_k e^{-s_k a} + \sum_{k=1}^{MN} \beta_k \right)^{-1}. \quad (2.44b)$$

Determinamos a nova constante arbitrária  $I_{jn}^*(0)$  pela aplicação das condições de contorno.

A equação (2.33) representa um conjunto de  $M$  sistemas de equações lineares algébricas, de ordem  $N$ , com as mesmas características das apresentadas pela equação (2.32), onde a integral em  $\lambda$  foi aproximada pela quadratura de Gauss. Assim, considerando a equação (2.40) como a representação matricial da equação (2.33), podemos, então, obter os elementos da matriz  $A_j(s)$ , para cada valor de energia  $j$ . Eles são definidos, para o sistema (2.33), por,

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\mu_j}{\mu_p} - \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (2.45)$$

e os elementos da matriz constante  $H_i$ , escritos como:

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q. \end{cases} \quad (2.46)$$

A transformada de Laplace é então aplicada, e a solução é obtida seguindo o formalismo apresentado para a equação (2.32), uma vez que ambas aproximações não resultam em matrizes significativamente diferentes.

A generalização da solução  $LTS_N$  para uma placa heterogênea assumindo a seção de choque de espalhamento diferencial de Klein-Nishina e modelo multigrupo é feita de maneira direta. De fato, aplicamos solução  $LTS_N$  para cada sub-camada e calculamos as constantes de integração aplicando-se as condições de contorno e de interface. Esse procedimento leva



ao seguinte resultado para uma placa arbitrária no domínio demonstrado na Figura (2.1):

$$I_{jn}^r(x) = \left( \sum_{k=1}^{jn} \beta_k^r e^{-s_k^r [(x_r - x_{r-1}) - x]} + \sum_{k=1}^{jn} \beta_k^r e^{s_k^r x} \right) I_{jn}^{r*}(0) + Z_{j-1}^r(x) * \mathcal{L}^{-1}\{[A_j^r(s)]^{-1}\}, \quad (2.47)$$

onde  $0 < x < x_R - x_{R-1}$ ,  $r = 1 : R$  e

$$I_{jn}^r(x) = \left[ I_{11}^r(x) \quad \dots \quad I_{1N}^r(x) \quad \dots \quad I_{j1}^r(x) \quad \dots \quad I_{jN}^r(x) \right]^T, \quad (2.48)$$

$$I_{jn}^r(0) = \left[ I_{11}^r(0) \quad \dots \quad I_{1N}^r(0) \quad \dots \quad I_{j1}^r(0) \quad \dots \quad I_{jN}^r(s) \right]^T. \quad (2.49)$$

Aqui  $I_{jn}^r(x)$  é o fluxo angular para uma placa genérica  $r$ .

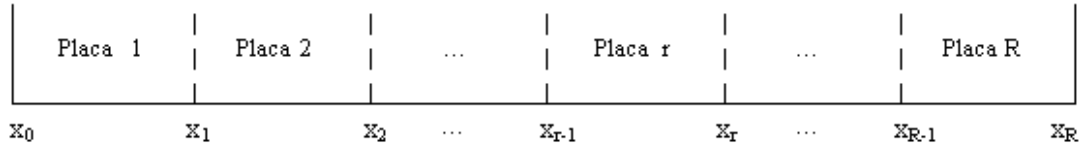


Figura 2.1 – Geometria unidimensional heterogênea

## CAPÍTULO 3

### RESULTADOS NUMÉRICOS PARA O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE FÓTONS EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL

Neste capítulo, apresentamos os resultados numéricos gerados pelo emprego do conhecido método  $LTS_N$ , apresentado no capítulo 2, na solução da equação de transporte de fótons em um domínio unidimensional homogêneo. Os resultados obtidos são comparados com referências da literatura.

#### 3.1 Uma Aplicação ao Cálculo do Fator de Build-up de Exposição

Para ilustrarmos a eficiência do emprego do método  $LTS_N$  na geração de resultados benchmark para problemas de transporte em uma placa plana, considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e modelo multigrupo, mostramos, em seqüência, simulações numéricas para o fator build-up de exposição.

Consideramos uma placa plana heterogênea tendo sua primeira camada uma espessura fixa de  $1\text{mfp}$  (“mean free path”), bem como um fluxo incidente em  $x = 0$  com intensidade igual a 1 (um) para o primeiro grupo de energia e 0 (zero) para os demais. Para tal, de acordo com a definição proposta por Fitzgerald [Fitzgerald et al, 1967], calculamos o fator de build-up de exposição como:

$$B_e(x) = \frac{\sum_{i=0}^j \frac{\mu_i^{ar}(\lambda_i)}{\rho} \varphi(x, \lambda_i)}{\frac{\mu_i^{ar}(\lambda_0)}{\rho} \varphi(x, \lambda_0)}. \quad (3.1)$$

Aqui o sub-índice 0 indica o fluxo incidente,  $\frac{\mu_i^{ar}(\lambda_i)}{\rho}$  é o coeficiente de atenuação do ar para o comprimento de onda  $\lambda_i$ ,  $\frac{\mu_i^{ar}(\lambda_0)}{\rho}$  é o coeficiente de atenuação do ar para o fluxo incidente (para o comprimento de onda  $\lambda_0$ ),  $\varphi(x, \lambda_i)$  é o fluxo escalar para o comprimento de onda  $\lambda_i$

e  $\varphi(x, \lambda_0)$  é o fluxo escalar incidente.

Os resultados numéricos apresentados foram obtidos assumindo-se cinco grupos de energia e um feixe de fótons com energia incidente de 1 MeV. Aqui, vale lembrar que os dados para os coeficientes de atenuação [Hirayama, 1995] foram os mesmo usados por Hirayama e Shin [Hirayama e Shin, 1998]. No que segue, apresentamos os resultados numéricos para os seguintes problemas:

Problema 1: Vamos considerar uma placa plana heterogênea com duas regiões constituídas por água ( $\mu_{ij}/\rho = 0.0707 \text{ cm}^2/\text{g}$ ,  $\text{mfp} = 1.0$ ) e chumbo ( $\mu_{ij}/\rho = 0.06848 \text{ cm}^2/\text{g}$ ,  $\text{mfp} = 4.0, 5.0, 10.0, 20.0, 30.0$  e  $40.0$ ) e condições de vácuo nas demais fronteiras.

	<i>Água 1.0 mfp + Chumbo</i>	
mfp	LTS <sub>16</sub>	EGS4
4.0	2.30	2.31
5.0	2.07	2.08
10.0	3.57	3.59
20.0	5.29	5.31
30.0	6.77	6.79
40.0	8.26	8.27

Tabela 3.1 – Simulação numérica para o fator build-up de exposição num meio heterogêneo formado por Água 1.0 mfp + Chumbo

Na Tabela 3.1 apresentamos a simulação numérica do método LTS<sub>N</sub> para o fator de build-up de exposição e comparações com os resultados obtidos por Hirayama e Shin pelo método EGS4 [Hirayama e Shin, 1998].

O método EGS4 (“Electron Gama Shower”, version 4), utiliza a técnica de Monte Carlo e descreve as interações de partículas (fótons, elétrons e/ou pósitrons) com a matéria em uma grande escala de energia, desde poucos keV até várias centenas de GeV. Esse código simula o transporte de radiação em formas geométricas arbitrárias e permite a inclusão de praticamente todos os materiais. As simulações utilizam interações eletromagnéticas de baixa energia: bremsstrahlung e ionização para elétrons, e efeito Rayleigh, espalhamento

$N$	$4 \text{ mfp}$	$10 \text{ mfp}$
2	2.29043291	3.56575823
4	2.29124721	3.56773931
6	2.29593785	3.56981458
8	2.29921456	3.57019857
12	2.30013541	3.57022344
14	2.30014775	3.57022455
16	2.30014786	3.57022457

Tabela 3.2 – Convergência numérica do método  $LTS_N$ 

Compton (seção de choque de Klein-Nishina aplicada a elétrons livres) e efeito fotoelétrico para fótons.

Analisando os resultados apresentados na Tabela 3.1 e considerando que aqueles obtidos pelo método EGS4 são gerados para modelos de um grupo de energia, podemos afirmar que eles apresentam uma boa concordância. Para enfatizarmos a provada convergência do método  $LTS_N$  [Pazos and Vilhena, 2000], na Tabela 3.2 apresentamos a convergência numérica dos resultados obtidos pelo método  $LTS_N$  para  $N$  crescente. De fato, observando os resultados obtidos para  $N = 14$  e  $N = 16$  percebemos a concordância em 6 dígitos significativos. Isto significa, lembrando que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto para o erro de arredondamento, que  $B_e(x) = 2.30$  e  $B_e(x) = 3.57$  são os resultados exatos para o problema 1 e, conseqüentemente, resultados benchmark para este problema. Esta afirmativa está fundamentada na já provada convergência do método  $LTS_N$  [Pazos and Vilhena, 2000].

Problema 2: Para conferirmos a influência do coeficiente de atenuação na solução do fator de build-up de exposição, vamos considerar uma placa plana de duas regiões composta por água ( $\mu_{tj}/\rho = 0.0707 \text{ cm}^2/\text{g}$ ,  $\text{mfp} = 1.0$ ) e ferro ( $\mu_{tj}/\rho = 0.0596 \text{ cm}^2/\text{g}$ ,  $\text{mfp} = 4.0, 5.0, 10.0, 20.0, 30.0$  e  $40.0$ ) e sujeita às condições de vácuo nas demais fronteiras.

Pela análise dos resultados obtidos para os problemas 1 e 2, podemos observar uma boa concordância entre aqueles encontrados pelo  $LTS_{16}$  e os obtidos pelo método EGS4. A

	<i>Água 1.0 mfp + Ferro</i>	
mfp	LTS <sub>16</sub>	EGS4
4.0	4.99	5.01
5.0	6.21	6.23
10.0	13.9	13.9
20.0	36.3	36.3
30.0	67.6	67.5
40.0	101.	101.

Tabela 3.3 – Simulação numérica para o fator build-up de exposição num meio heterogêneo formado por Água 1.0 mfp + Ferro

precisão encontrada para os resultados no problema 1, uma vez empregado o método LTS<sub>16</sub>, nos permite afirmar, baseados nos mesmos argumentos, que os resultados encontrados para o fator de build-up de exposição para o problema 2 são também resultados benchmark.

Nas simulações numéricas implementadas não foram utilizados, na primeira sub-camada, elementos como o chumbo, de alta densidade e alto número atômico ( $Z$ ). Na presença de materiais com essas características há a produção de outros efeitos que predominam sobre o espalhamento Compton, aqui modelado por Klein-Nishina e que devem ser inseridos na formulação para a obtenção de bons resultados. Isso pode ser observado na figura ??.

Devemos mencionar também que os cálculos utilizando-se o método LTS <sub>$N$</sub>  foram realizados em um microcomputador AMD Athlon 1700 (1.4 GHz). Além disso, o tempo computacional máximo observado para gerar todos os resultados em cada tabela foi de aproximadamente 90 segundos.

## CAPÍTULO 4

# SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN EM DUAS DIMENSÕES PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA

### 4.1 O Método $LTS_N$ Nodal Bidimensional

Podemos facilmente estender a equação de transporte de fótons em uma dimensão, com o núcleo de Klein-Nishina, para problemas em duas dimensões.

Uma vez obtida a equação de transporte em duas dimensões para o transporte de fótons, podemos resolvê-la aplicando o método  $LTS_N$  nodal bidimensional. A principal idéia do método está na solução das duas equações  $S_N$  unidimensionais, resultantes da integração transversa das equações  $S_N$  no retângulo, pelo bem conhecido método  $LTS_N$ . Uma vez aproximados por exponenciais os termos de fuga transversal, que surgem nas equações  $S_N$  integradas transversalmente, nos é possível determinar uma solução analítica para a equação de transporte de fótons em um domínio retangular.

Para isso, assumindo o kernel de espalhamento de Klein-Nishina, consideremos o problema  $S_N$  nodal bidimensional, modelo multigrupo em energia, sem fonte externa, dado por [Rodriguez et al, 2007],

$$\begin{aligned} & \mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_{jn}(x, y) + \eta_n \frac{\partial}{\partial y} I_{jn}(x, y) + \mu_{lj} I_{jn}(x, y) = \\ & = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_l(\mu_i) I_{ri}(x, y) \omega_i, \end{aligned} \quad (4.1)$$

em um domínio retangular  $0 \leq x \leq a$  e  $0 \leq y \leq b$ , um fluxo incidente em  $x = 0$  e para qualquer  $y$  com intensidade igual a 1 (um) para o primeiro grupo de energia e sujeito a condições de vácuo nas demais fronteiras. Aqui  $n = 1 : \mathcal{N}$  (números inteiros de 1 até

$\mathcal{N}$ , inclusive),  $\mathcal{N} = N \frac{(N+2)}{2}$ ,  $N$  é a ordem da quadratura angular,  $N$  é a cardinalidade do conjunto de ordenadas discretas (número de direções discretas),  $j = 1 : M$ , com  $M$  o número de grupos de energia,  $\mu_{lj}$  é o coeficiente de atenuação,  $I_{jn}(x, y)$  denota a intensidade do fluxo angular de partículas na direção discreta  $\Omega_n = (\mu_n, \eta_n)$  para o grupo de energia  $j$ ,  $w_n$  é o respectivo peso na quadratura angular de simetria de nível [Lewis e Miller, 1984].

Para construirmos a solução  $LTS_N$  nodal para o problema (4.1), integramos essa equação com respeito a  $x$  entre os limites 0 e  $a$ . Dividimos por  $a$ , o que resulta a equação nodal unidimensional na variável  $y$

$$\begin{aligned} & \eta_n \frac{d}{dy} I_{jny}(y) + \frac{\mu_n}{a} \left[ I_{jn}(a, y) - I_{jn}(0, y) \right] + \mu_{lj} I_{jny}(y) = \\ & = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_l(\mu_i) I_{riy}(y) \omega_i, \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde, para  $n = 1 : \mathcal{N}$ ,  $I_{jn}(a, y)$  e  $I_{jn}(0, y)$  são as intensidades de fluxos angulares incidentes e emergentes dos contornos e a intensidade de fluxo angular médio ao longo do lado  $x$  de comprimento  $a$  na direção discreta  $\Omega_n = (\mu_n, \eta_n)$  é definida como,

$$I_{jny}(y) = \frac{1}{a} \int_0^a I_{jn}(x, y) dx. \quad (4.3)$$

Analogamente, integrando a equação (4.1) com respeito a  $y$  entre os limites 0 e  $b$ , e dividindo por  $b$ , resulta a equação nodal unidimensional na variável  $x$  dada por

$$\begin{aligned} & \mu_n \frac{d}{dx} I_{jnx}(x) + \frac{\eta_n}{b} \left[ I_{jn}(x, 0) - I_{jn}(x, b) \right] + \mu_{lj} I_{jnx}(x) = \\ & = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_l(\mu_i) I_{rix}(x) \omega_i, \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde, para  $n = 1 : \mathcal{N}$ ,  $I_{jn}(x, b)$  e  $I_{jn}(x, 0)$  são as intensidades de fluxos angulares incidentes e emergentes dos contornos e a intensidade de fluxo angular médio ao longo do lado  $y$  de comprimento  $b$  na direção discreta  $\Omega_n = (\mu_n, \eta_n)$  é dada por

$$I_{jnx}(x) = \frac{1}{b} \int_0^b I_{jn}(x, y) dy. \quad (4.5)$$

Nesse ponto podemos aplicar o método  $LTS_N$ .

## 4.2 Método $LTS_N$ Nodal Utilizando Aproximação Exponencial

O método  $LTS_N$  nodal bidimensional [Zabada, 1994] consiste em resolver as equações nodais, (4.2) e (4.4), através do uso da transformada de Laplace.

Assim, aplicando a transformada de Laplace com respeito a  $y$  em (4.2) e denotando  $\mathcal{L}\{I_{jny}(y)\} = \overline{I_{jny}(s)}$ , obtemos o sistema linear algébrico dado por,

$$\begin{aligned} s\overline{I_{jny}(s)} + \frac{\mu_j}{\eta_n} \overline{I_{jny}(s)} - \frac{\Delta}{3\eta_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \times \\ \times \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_l(\mu_i) \overline{I_{riy}(s)} \omega_i = I_{jny}(0) - \frac{\mu_n}{a\eta_n} \left[ \overline{I_{jn}(a, s)} - \overline{I_{jn}(0, s)} \right], \end{aligned} \quad (4.6)$$

para  $j = 1 : M$  e  $n = 1 : \mathcal{N}$ , que pode ser representado matricialmente por,

$$(sI - B_{jny}) \overline{I_{jny}(s)} = I_{jny}(0) + \overline{Z_{(j-1)y}(s)} + \overline{S_{jny}(s)}. \quad (4.7)$$

Aqui  $\overline{I_{jny}(s)}$  é o vetor do fluxo angular transformado por Laplace com  $\mathcal{N}$  componentes na variável  $y$  e  $I_{jny}(0)$  é o vetor do fluxo angular com  $\mathcal{N}$  componentes na variável  $y$  em  $y = 0$ .

Eles possuem a seguinte forma:

$$\overline{I_{jny}(s)} = \left[ \overline{I_{j1y}(s)} \quad \overline{I_{j2y}(s)} \quad \dots \quad \overline{I_{j\mathcal{N}y}(s)} \right]^T, \quad (4.8)$$

$$I_{jny}(0) = \left[ I_{j1y}(0) \quad I_{j2y}(0) \quad \dots \quad I_{j\mathcal{N}y}(0) \right]^T. \quad (4.9)$$

Por outro lado, as componentes da matriz  $B_{jny}$  são dadas por,



$$b_y(p, q) = \begin{cases} -\frac{\mu_j}{\eta_p} + \frac{\Delta}{3\eta_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\eta_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (4.10)$$

e o termo de espalhamento é representado por

$$\overline{Z_{(j-1)y}(s)} = \sum_{i=1}^{j-1} H_{iy} \overline{I_{iny}(s)}, \quad (4.11)$$

onde as entradas da matriz constante  $H_{iy}$  são escritas como

$$h_y(p, q) = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\eta_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\eta_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q. \end{cases} \quad (4.12)$$

O vetor  $\overline{S_{jny}(s)}$  tem a componente genérica

$$\overline{S_{jny}(s)} = -\frac{\mu_i}{a\eta_i} \left[ \overline{I_{ji}(a, s)} - \overline{I_{ji}(0, s)} \right]. \quad (4.13)$$

Similarmente, aplicando a transformada de Laplace com respeito a  $x$  na equação (4.4) e denotando  $\mathfrak{L}\{I_{jnx}(x)\} = \overline{I_{jnx}(s)}$ , obtemos o sistema linear dado por

$$\begin{aligned} s\overline{I_{jnx}(s)} + \frac{\mu_j}{\mu_n} \overline{I_{jnx}(s)} - \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha k_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \times \\ \times \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} P_l(\mu_i) \overline{I_{rix}(s)} \omega_i = I_{jnx}(0) + \frac{\eta_n}{a\mu_n} \left[ \overline{I_{jn}(s, b)} - \overline{I_{jn}(s, 0)} \right], \end{aligned} \quad (4.14)$$

que, similarmente, pode ser reescrito na forma matricial como

$$(sI - A_{jnx}) \overline{I_{jnx}(s)} = I_{jnx}(0) + \overline{Z_{(j-1)x}(s)} + \overline{S_{jnx}(s)}. \quad (4.15)$$

Aqui  $\overline{I_{jnx}(s)}$  é o vetor de  $\mathcal{N}$  componentes do fluxo angular transformado por Laplace na variável  $x$  e  $I_{jnx}(0)$  é o vetor de  $\mathcal{N}$  componentes do fluxo angular na variável  $x$  no ponto

$x = 0$ . Eles têm a seguinte forma:

$$\overline{I_{jnx}(s)} = \left[ \overline{I_{j1x}(s)} \quad \overline{I_{j2x}(s)} \quad \dots \quad \overline{I_{jN_x}(s)} \right]^T, \quad (4.16)$$

$$I_{jnx}(0) = \left[ I_{j1x}(0) \quad I_{j2x}(0) \quad \dots \quad I_{jN_x}(0) \right]^T. \quad (4.17)$$

Por outro lado, as entradas da matriz  $A_{jnx}$  são escritas como

$$a_x(p, q) = \begin{cases} -\frac{\mu_j}{\mu_p} + \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha k_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (4.18)$$

e o termo de espalhamento é dado por,

$$\overline{Z_{(j-1)x}(s)} = \sum_{i=1}^{j-1} H_{ix} \overline{I_{inx}(s)}, \quad (4.19)$$

onde a matriz constante  $H_{ix}$  tem seus elementos representados por

$$h_x(p, q) = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha k_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (4.20)$$

O vetor  $\overline{S_{jnx}(s)}$  é escrito como,

$$\overline{S_{jix}(s)} = \frac{\eta_i}{b\mu_i} \left[ \overline{I_{ji}(s, b)} - \overline{I_{ji}(s, 0)} \right]. \quad (4.21)$$

As soluções  $LTS_N$  para as equações (4.7) e (4.15) são dadas, respectivamente por

$$\overline{I_{jny}(s)} = (sI - B_{jny})^{-1} \left[ I_{jny}(0) + \overline{Z_{(j-1)y}(s)} + \overline{S_{jny}(s)} \right], \quad (4.22)$$

e

$$\overline{I_{jnx}(s)} = (sI - A_{jnx})^{-1} \left[ I_{jnx}(0) + \overline{Z_{(j-1)x}(s)} + \overline{S_{jnx}(s)} \right]. \quad (4.23)$$

Para a determinação das intensidades dos fluxos angulares, aplicamos a transformada de Laplace inversa em (4.22) e (4.23) e o resultado obtido é,

$$I_{jny}(y) = \mathfrak{L}^{-1} \left\{ (sI - B_{jny})^{-1} \left[ I_{jny}(0) + \overline{Z_{(j-1)y}(s)} + \overline{S_{jny}(s)} \right] \right\}, \quad (4.24)$$

e,

$$I_{jnx}(x) = \mathfrak{L}^{-1} \left\{ (sI - A_{jnx})^{-1} \left[ I_{jnx}(0) + \overline{Z_{(j-1)x}(s)} + \overline{S_{jnx}(s)} \right] \right\}. \quad (4.25)$$

Neste ponto aplicamos o método da diagonalização [Segatto et al, 1999] usado em problemas de transporte com elevados graus de anisotropia e de quadratura angular, para determinarmos  $\mathfrak{L}^{-1}\{(sI - B_{jny})\}^{-1}$  e  $\mathfrak{L}^{-1}\{(sI - A_{jnx})\}^{-1}$ . Aqui, caso os autovalores das matrizes  $B_{jny}$  e  $A_{jnx}$  sejam reais, a transformada de Laplace inversa das equações (4.24) e (4.25), têm a mesma expressão para aquela obtida para a equação (2.44). A explicação para essa afirmativa segue do fato que as matrizes  $A_{jnx}$  e  $B_{jny}$  são também não degenerativas.

Por outro lado, os autovalores das matrizes  $B_{jny}$  e  $A_{jnx}$  podem ser complexos. Sendo assim, para a diagonalização dessas matrizes, é necessária uma generalização [Simch, 2004] do método original da diagonalização, de forma a obter a abrangência desses autovalores.

Então sejam  $\mathbb{D}$  a matriz que contém os autovalores de  $B_{jny}$  e  $\mathbb{X}$  a matriz dos autovetores associados a esses autovalores. Inicialmente, por analogia ao caso em uma dimensão, é considerado que a matriz  $B_{jny}$  pode ser decomposta de modo que

$$B_{jny} = \mathbb{X}\mathbb{D}\mathbb{X}^{-1}, \quad (4.26)$$

de onde,

$$\mathfrak{L}^{-1}\left\{(sI - B_{jny})\right\}^{-1} = \mathbb{X}\mathfrak{L}^{-1}\left\{(sI - \mathbb{D})\right\}^{-1}\mathbb{X}^{-1}. \quad (4.27)$$

Agora, utilizando-se a simbologia,

$$\mathbb{D}_1 = \Re e(\mathbb{D}) \text{ e } \mathbb{D}_2 = \Im m(\mathbb{D}), \quad (4.28)$$

é obtida a expressão,

$$\mathfrak{L}^{-1}\left\{(sI - \mathbb{D})\right\}^{-1} = e^{(y\mathbb{D}_1)} \cos(y\mathbb{D}_2) + ie^{(y\mathbb{D}_1)} \sin(y\mathbb{D}_2). \quad (4.29)$$

Substituindo-se as equações (4.27) e (4.29) na equação (4.24), obtemos,

$$\begin{aligned} I_{jny}(y) &= [\mathbb{X}_1 + i\mathbb{Y}_1][e^{(y\mathbb{D}_1)} \cos(y\mathbb{D}_2) + ie^{(y\mathbb{D}_1)} \sin(y\mathbb{D}_2)][\mathbb{X}_2 + i\mathbb{Y}_2]I_{jny}(0) + \\ &+ \left[ Z_{(j-1)y}(y) \right] * \left\{ [\mathbb{X}_1 + i\mathbb{Y}_1][e^{(y\mathbb{D}_1)} \cos(y\mathbb{D}_2) + ie^{(y\mathbb{D}_1)} \sin(y\mathbb{D}_2)][\mathbb{X}_2 + i\mathbb{Y}_2] \right\} + \\ &+ \left[ S_{jny}(y) \right] * \left\{ [\mathbb{X}_1 + i\mathbb{Y}_1][e^{(y\mathbb{D}_1)} \cos(y\mathbb{D}_2) + ie^{(y\mathbb{D}_1)} \sin(y\mathbb{D}_2)][\mathbb{X}_2 + i\mathbb{Y}_2] \right\}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

para

$$\mathbb{X}_1 = \Re e(\mathbb{X}) \text{ e } \mathbb{Y}_1 = \Im m(\mathbb{X}), \quad (4.31)$$

$$\mathbb{X}_2 = \Re e(\mathbb{X}^{-1}) \text{ e } \mathbb{Y}_2 = \Im m(\mathbb{X}^{-1}). \quad (4.32)$$

Aqui \* representa convolução.

Considerando que  $I_{jny}(y) \in \mathfrak{R}^{jn}$ , as matrizes  $(e^{(y\mathbb{D}_1)})$ ,  $(\cos(\mathbb{D}_2))$  e  $(\sin(\mathbb{D}_2))$  comutam e procedendo a mudança de variáveis, usual no método  $LTS_N$ , na parte de  $\mathbb{D}$ , a solução  $LTS_N$  nodal bidimensional fica reduzida a

$$\begin{aligned}
I_{jny}(y) &= \left[ \mathbb{X}_1 \cos(y\mathbb{D}_2) - \mathbb{Y}_1 \sin(y\mathbb{D}_2) \right] \times \\
&\times e^{\mathbb{D}^*(y)} W^1 - \left[ \mathbb{X}_1 \sin(y\mathbb{D}_2) + \mathbb{Y}_1 \cos(y\mathbb{D}_2) \right] e^{\mathbb{D}^*(y)} W^2 + \\
&+ \left[ Z_{(j-1)y}(y) + S_{jny}(y) \right] * \left[ \mathbb{X}_1 \cos(y\mathbb{D}_2) - \mathbb{Y}_1 \sin(y\mathbb{D}_2) \right] e^{y\mathbb{D}^1} \mathbb{X}_2 - \\
&- \left[ Z_{(j-1)y}(y) + S_{jny}(y) \right] * \left[ \mathbb{X}_1 \sin(y\mathbb{D}_2) + \mathbb{Y}_1 \cos(y\mathbb{D}_2) \right] e^{y\mathbb{D}^1} \mathbb{Y}_2,
\end{aligned} \tag{4.33}$$

onde

$$\mathbb{D}^*(y) = \begin{cases} yd_1(i, i) & \text{se } d_1(i, i) < 0 \\ (y - y_0)d_1(i, i) & \text{se } d_1(i, i) > 0 \end{cases} \tag{4.34}$$

com  $d_1(i, i)$  elementos da diagonal de  $\mathbb{D}_1$  e

$$W^1 = e^{-D^*(0)} \mathbb{X}_2 I_{jny}(0) \tag{4.35}$$

$$W^2 = e^{-D^*(0)} \mathbb{Y}_2 I_{jny}(0) \tag{4.36}$$

vetores modificados em consequência da mudança de base.

Repetindo-se o mesmo processo para a matriz  $A_{jnx}$ , obtemos a solução em  $x$  escrita como

$$\begin{aligned}
I_{jnx}(x) &= \left[ \mathbb{X}_3 \cos(x\mathbb{E}_2) - \mathbb{Y}_3 \sin(x\mathbb{E}_2) \right] \times \\
&\times e^{\mathbb{E}^*(x)} W^3 - \left[ \mathbb{X}_3 \sin(x\mathbb{E}_2) + \mathbb{Y}_3 \cos(x\mathbb{E}_2) \right] e^{\mathbb{E}^*(x)} W^4 + \\
&+ \left[ \mathbb{X}_3 \cos(x\mathbb{E}_2) - \mathbb{Y}_3 \sin(x\mathbb{E}_2) \right] e^{x\mathbb{E}^1} \mathbb{X}_4 * \left[ Z_{(j-1)x}(x) + S_{jnx}(x) \right] - \\
&- \left[ \mathbb{X}_3 \sin(x\mathbb{E}_2) + \mathbb{Y}_3 \cos(x\mathbb{E}_2) \right] e^{x\mathbb{E}^1} \mathbb{Y}_4 * \left[ Z_{(j-1)x}(x) + S_{jnx}(x) \right],
\end{aligned} \tag{4.37}$$

com  $\mathbb{E}$  a matriz que contém os autovalores de  $A_{jnx}$ , e  $\mathbb{V}$  a matriz dos autovetores associados a esses autovalores e a simbologia

$$\mathbb{E}_1 = \Re e(\mathbb{E}) \text{ e } \mathbb{E}_2 = \Im m(\mathbb{E}), \quad (4.38)$$

$$\mathbb{X}_3 = \Re e(\mathbb{V}) \text{ e } \mathbb{Y}_3 = \Im m(\mathbb{V}), \quad (4.39)$$

$$\mathbb{X}_4 = \Re e(\mathbb{V}^{-1}) \text{ e } \mathbb{Y}_4 = \Im m(\mathbb{V}^{-1}), \quad (4.40)$$

$$\mathbb{E}^*(x) = \begin{cases} x e_1(i, i) & \text{se } e_1(i, i) < 0 \\ (x - x_0) e_1(i, i) & \text{se } e_1(i, i) > 0 \end{cases} \quad (4.41)$$

com  $e_1(i, i)$  elementos da diagonal de  $\mathbb{E}_1$  e

$$W^3 = e^{-E^*(0)} \mathbb{X}_4 I_{jnx}(0) \quad (4.42)$$

$$W^4 = e^{-E^*(0)} \mathbb{Y}_4 I_{jnx}(0). \quad (4.43)$$

Para completarmos a solução, devemos determinar os fluxos angulares desconhecidos nas fronteiras. São eles  $I_{jn}(x, 0)$ ,  $I_{jn}(0, y)$ ,  $I_{jn}(x, b)$  e  $I_{jn}(a, y)$ . Fundamentados na física de penetração profunda, onde o fluxo decresce à medida que se distancia da fonte, utilizamos a aproximação exponencial [Hauser, 2002] para expressarmos os fluxos angulares médios. Assim, os fluxos angulares médios são escritos como,

$$I_{jn}(x, 0) = F_{jn} e^{-\text{sign}(\mu_n) \Lambda x} \quad (4.44)$$

$$I_{jn}(0, y) = G_{jn} e^{-sign(\eta_n)\Lambda y} \quad (4.45)$$

$$I_{jn}(x, b) = O_{jn} e^{-sign(\mu_n)\Lambda x} \quad (4.46)$$

$$I_{jn}(a, y) = P_{jn} e^{-sign(\eta_n)\Lambda y} \quad (4.47)$$

onde  $sign(\mu)$  representa a função sinal

$$sign(\mu) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mu > 0 \\ -1 & \text{if } \mu < 0 \end{cases} \quad (4.48)$$

e  $\Lambda$  representa a constante de decaimento, que deve ser escolhida a priori. Nesse trabalho, assumimos  $\Lambda$ , de acordo com Hauser [Hauser, 2002], como sendo a seção de choque de absorção, dada por,

$$\Lambda = \sigma_a = \sigma_t - \sigma_s. \quad (4.49)$$

As funções  $sign(\mu_n)$  e  $sign(\eta_n)$  que aparecem nas equações (4.44) - (4.47) garantem que os fluxos angulares aproximados irão decair para qualquer direção discreta à medida que se afastam da fonte. Substituindo (4.44) - (4.47) nas equações (4.24) e (4.25) as soluções para o fluxo angular  $x$ -médio e o fluxo angular  $y$ -médio estão completas após a transformada inversa de Laplace. Aplicando as condições de contorno, determinamos as constantes de integração e conseqüentemente a solução  $LTS_N$  nodal bidimensional está bem determinada.

### 4.3 Cálculo da Taxa de Dose Absorvida

A taxa de dose absorvida é dada por,

$$\dot{D} = \frac{dD}{dt}, \quad (4.50)$$

onde  $dD$  é a variação da dose absorvida por unidade de tempo  $dt$ .

A taxa de dose total absorvida devido a um fluxo de fótons de diferentes energias incidindo em um meio material homogêneo ou heterogêneo, será a soma de todas as taxas de dose, para cada valor de energia considerado. Desta forma, a taxa de dose absorvida, obtida em função do fluxo escalar, pode ser calculada pela seguinte expressão,

$$\dot{D}_{Tf}(x, y) = \sum_{i=0}^M \frac{\mu_{a_i}}{\rho} E_i \psi_i(x, y), \quad (4.51)$$

onde  $\frac{\mu_{a_i}}{\rho}$  é o coeficiente de absorção do meio material em  $\text{cm}^2/\text{g}$  para a energia  $E_i$  (MeV) e  $\psi_i(x, y)$  é o fluxo escalar de fótons em energia nas variáveis de interesse  $(x, y)$ , com,

$$\frac{\mu_{a_i}}{\rho} = \frac{\mu_a(\lambda_i)}{\rho} \quad (4.52)$$

e,

$$\lambda_i = \frac{0.511}{E_i}. \quad (4.53)$$

sendo o fluxo escalar em energia, dado pela seguinte expressão,

$$\psi_i(x, y) \equiv \psi(x, y, \lambda_i) = \int_0^1 \int_{-1}^1 \psi(x, y, \lambda_i, \mu) d\mu d\eta. \quad (4.54)$$

Mais precisamente, calculamos os fluxos angular e escalar para cada nível de energia.



## CAPÍTULO 5

# SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN EM DUAS DIMENSÕES PARA ELÉTRONS

### 5.1 Introdução

Em terapia de feixes externos, elétrons secundários são produzidos por ionizações das interações de fótons primários - usualmente espalhamento Compton. A dose absorvida é devido à energia depositada no meio por esses elétrons livres, que causam ionizações e quebram ligações químicas formando radicais livres que atacam a funcionalidade das células. Interações de partículas carregadas são qualitativamente diferentes de interações de partículas neutras. Enquanto partículas neutras devem “bater em algo” para interagir, elétrons livres interagem ao longo de todo o alcance da força coulombiana. Mais precisamente as interações ocorrem com os elétrons orbitais distantes, causando excitação ou ionização do átomo com pequena perda de energia ou troca na direção pelo elétron livre. Isso é chamado de reação inelástica leve, que ocorre continuamente, porque o elétron sempre experimenta uma força Coulombiana dos átomos na vizinhança. Alternativamente o elétron livre pode sofrer uma colisão inelástica forte, resultando em um grande ângulo de espalhamento e depositando uma grande fração de sua energia no elétron ejetado. Essa reação ocorre raramente comparada as colisões leves, mas deposita muito mais energia por evento. Interações radiativas fortes e leves entre elétrons livres energéticos e o forte campo elétrico na vizinhança do núcleo atômico podem também ocorrer, produzindo fótons “bremsstrahlung” secundários. Seções de choque para essas reações inelásticas radiativas são grandes para materiais com alto  $Z$  (número atômico) e elétrons de alta energia; e assim podem ser importantes em calcular espectros de fontes de raios-X de LINACS ou em terapia com feixe de elétrons, mas são normalmente desconsideradas para o transporte de elétrons Compton no tecido. Elétrons

também espalham-se elasticamente do núcleo, causando trocas irregulares na direção sem perda de energia.

Extensões do método de ordenadas discretas para descrever o transporte de elétrons têm sido uma área atuante de pesquisa por quase vinte anos. A técnica convencional de ordenadas discretas para a representação da distribuição angular de espalhamento pela expansão de Legendre para a equação de transporte de Boltzmann para elétrons não funciona muito bem para interações inelásticas leves. Uma aproximação alternativa é a Aproximação de Fokker-Planck (FP), que representa um processo de espalhamento onde os elétrons perdem energia e trocam de direção de forma contínua. Essa aproximação pode ser obtida de uma expansão em séries de Taylor do integrando no termo de espalhamento da equação de Boltzmann, assumindo que somente pequenas variações na energia e na direção são significativas.

Sendo assim, neste capítulo, apresentamos uma formulação para a obtenção da solução da equação de Fokker-Planck para o transporte de elétrons. Para construirmos a solução, começamos pela aplicação da aproximação  $P_N$  na variável angular da equação de transporte de elétrons, seguida do uso da transformada de Laplace na variável espacial  $x$ , obtendo-se dessa forma uma equação diferencial linear de primeira ordem na variável espacial  $y$ , cuja solução pode ser feita de maneira direta.

## 5.2 Formulação

Consideremos a equação de transporte de elétrons dependente da energia em duas dimensões, invariante no tempo, sem fonte externa,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial y} + \sigma_t(E) \psi(x, y, \bar{\Omega}, E) = \\ = \int dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \psi(x, y, \bar{\Omega}', E'), \end{aligned} \quad (5.1)$$

em um retângulo  $0 \leq x \leq a$  e  $0 \leq y \leq b$ , onde  $\psi(x, y, \bar{\Omega}, E)$  representa o fluxo angular de partículas com energia  $E$  na direção  $\bar{\Omega} = (\mu, \eta)$ , com  $\psi(x, y, \bar{\Omega}, E)$  conhecido nas fronteiras e a seção de choque diferencial de espalhamento descrita como,

$$\sigma_s(E, \mu_0) = \sum_{l=0}^{L \leq N} \frac{2l+1}{2} \sigma_{sl}(E) P_l(\mu_0), \quad N \text{ ímpar} \quad (5.2)$$

onde  $\mu_0 = \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$  é o cosseno ângulo de espalhamento,  $\sigma_{sl}$  é a  $l$ -ésima componente da seção de choque diferencial de espalhamento. Vale ressaltar que no presente trabalho é usado como núcleo de espalhamento a seção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford escrita como,

$$\sigma_s(E, \mu_0) = \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B} - \mu_0^2}, \quad (5.3)$$

onde,

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2\pi\bar{\lambda}} \cdot 2\eta_*(\eta_* + 1), \quad a > 0 \quad (5.4)$$

e,

$$\mathcal{B} = 1 + 2\eta_*, \quad (5.5)$$

com  $\bar{\lambda} = \frac{1}{\sigma_t(E)}$  indicando o livre caminho médio percorrido pelas partículas no meio. Ainda nas equações (5.4) e (5.5) temos uma constante,  $\eta_* > 0$ , dada por,

$$\eta_* = \frac{h^2 Z^{\frac{2}{3}}}{4(a_H)^2 (m_e v)^2}, \quad (5.6)$$

sendo  $h$  a constante de Planck ( $= 6.63 \times 10^{-34} \text{J.s}$ ),  $a_H$  o raio de Bohr ( $= 5.29 \times 10^{-11} \text{m}$ ),  $Z$  o número atômico do material que está sendo irradiado e  $m_e v$  o momento do elétron que está sofrendo espalhamento ( $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{Kg}$  e  $v = 10^4 \text{m/s}$ ).

### 5.2.1 Aproximação multigrupo

O tratamento multigrupo para a variável energia requer que seu domínio seja dividido em  $G$  intervalos. As partículas no grupo  $g$  são aquelas com energia entre  $E_{g+\frac{1}{2}}$  e  $E_{g-\frac{1}{2}}$  e o  $g = 1$  representa o grupo de maior energia e  $g = G$  o grupo de menor energia. O fluxo angular do grupo é definido como

$$\psi_g(x, y, \Omega) = \frac{1}{\Delta E_g} \int_{E_{g+\frac{1}{2}}}^{E_{g-\frac{1}{2}}} dE \psi(x, y, \bar{\Omega}, E). \quad (5.7)$$

A integral sobre todas as energias é então definida como segue

$$\int_0^\infty dE = \sum_{g=1}^G \int_g dE = \sum_{g=1}^G \Delta E_g. \quad (5.8)$$

As seções de choque multigrupo são tratadas como constantes dentro de cada grupo de energia e são definidas como

$$\sigma_g = \frac{1}{\Delta E_g} \int_{E_{g+\frac{1}{2}}}^{E_{g-\frac{1}{2}}} dE \sigma(E). \quad (5.9)$$

Introduzindo a aproximação multigrupo no termo integral do lado esquerdo da equação 5.1 temos

$$\begin{aligned} & \int dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \psi(x, y, \bar{\Omega}', E') = \\ & = \sum_{g=1}^G \int_g dE \int_{g'} dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \psi(x, y, \bar{\Omega}', E'). \end{aligned} \quad (5.10)$$

A seção de choque de espalhamento diferencial do grupo  $g$  para  $g'$  é escrita como

$$\sigma_s^{g' \rightarrow g}(\bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) = \int_g dE \int_{g'} dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \quad (5.11)$$

### 5.2.2 Aproximação de Fokker-Planck

A aproximação de Fokker-Planck para a equação (5.1) é escrita como,

$$\mu \frac{\partial \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial y} = \frac{\sigma_{tr}}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[ (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E), \quad (5.12)$$

onde  $\psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E)$  representa o fluxo angular de partículas com energia  $E$  na direção  $\bar{\Omega} = (\mu, \eta)$  aproximado por Fokker-Planck e  $\sigma_{tr}$  representa a seção de choque de transporte e é definida por

$$\sigma_{tr} = 2\pi \int_{-1}^1 \int_0^1 \sigma_s(E, \mu_0) (1 - \mu_0) d\mu_0 d\eta. \quad (5.13)$$

O termo diferencial do lado direito da equação (5.12) pode ser reescrito sob a forma

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[ (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E) = \left[ (1 - \mu^2) \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - 2\mu \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E). \quad (5.14)$$

Substituindo a equação (5.14) na equação (5.12) obtemos

$$\mu \frac{\partial \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E)}{\partial y} = \frac{\sigma_{tr}}{2} \left[ (1 - \mu^2) \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - 2\mu \frac{\partial}{\partial \mu} \right] \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E). \quad (5.15)$$

Para a aplicação da aproximação  $P_N$ , o fluxo angular é aproximado por uma série finita em termos de polinômio de Legendre,

$$\psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E) = \sum_{l=0}^L \frac{2n+1}{2} \psi_n^{FP}(x, y, E) P_n(\mu). \quad (5.16)$$

Definimos ainda o momento do fluxo angular de Legendre,

$$\begin{aligned} \psi_n^{FP}(x, y, E) &= 2\pi \int_{\bar{\Omega}} \psi^{FP}(x, y, \bar{\Omega}, E) P_n(\mu') d\bar{\Omega}' = \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 \int_0^1 \psi^{FP}(x, y, \mu', \eta', E) P_n(\mu') d\mu' d\eta'. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Substituindo a equação (5.16) na equação (5.15), aplicando na equação resultante o operador

$$\int_{-1}^1 \int_0^1 ( ) P_m(\mu) d\mu d\eta, \text{ com } m = 0, \dots, N, \quad (5.18)$$

escrevendo  $\eta$  em termos de  $\mu$  ( $\eta = \sqrt{1 - \mu^2}$ ) e utilizando a fórmula de recorrência,

$$\mu P_n(\mu) = \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(\mu) + \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(\mu), \quad (5.19)$$

bem como a propriedade de ortogonalidade dos polinômios de Legendre [Strang, 1988], [Kreider, 1966], obtém-se o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas nas variáveis  $x$  e  $y$ ,

$$\begin{aligned} \frac{n+1}{2n+1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{n+1}^{FP}(x, y, E) + \frac{n}{2n+1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{n-1}^{FP}(x, y, E) + \frac{2n+1}{2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_n^{FP}(x, y, E) T_n = \\ = \frac{\sigma_{tr}}{2} [-n(n+1)] \psi_n^{FP}(x, y, E), \end{aligned} \quad (5.20)$$

com  $n=0, \dots, N$ , sendo  $\psi_{N+1}^{FP}(x, y, E) = 0$  na aproximação  $P_N$  e  $T_n$  representado por uma integral que pode ser resolvida analiticamente escrita como,

$$T_n = \int_{-1}^1 \sqrt{(1 - \mu^2)} P_n(\mu) P_{n+1}(\mu) d\mu. \quad (5.21)$$

Aplicando a transformada de Laplace na variável espacial  $x$  da equação (5.20), resulta o seguinte sistema de equações algébricas:

$$\begin{aligned} \frac{n+1}{2n+1} \left[ \overline{s\psi_{n+1}^{FP}}(s, y, E) - \overline{\psi_{n+1}^{FP}}(0, y, E) \right] + \frac{n}{2n+1} \left[ \overline{s\psi_{n-1}^{FP}}(s, y, E) - \overline{\psi_{n-1}^{FP}}(0, y, E) \right] + \\ + \frac{2n+1}{2} \frac{\partial}{\partial y} \overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E) T_n = \frac{\sigma_{tr}}{2} [-n(n+1)] \overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E), \end{aligned} \quad (5.22)$$

com  $n=0, \dots, N$  e  $\overline{\psi_{n-1}^{FP}}(s, y, E)$ ,  $\overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E)$  e  $\overline{\psi_{n+1}^{FP}}(s, y, E)$  denotam os fluxos angulares transformados na variável espacial  $x$ .

O sistema descrito na equação (5.22) pode ser reescrito na seguinte forma matricial,

$$A_n \overline{\psi_n^{FP'}}(s, y, E) + B_n(s) \overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E) - C_n \psi_n^{FP}(0, y, E) = 0. \quad (5.23)$$

Aqui  $\overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E)$  é o vetor com  $N$  componentes do fluxo angular transformado por Laplace na variável  $x$  e  $\psi_n^{FP}(0, y, E)$  é o vetor com  $N$  componentes do fluxo angular em  $x = 0$ . Eles possuem a seguinte forma:

$$\overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E) = \left[ \overline{\psi_0^{FP}}(s, y, E) \quad \overline{\psi_1^{FP}}(s, y, E) \quad \dots \quad \overline{\psi_N^{FP}}(s, y, E) \right]^T, \quad (5.24)$$

$$\psi_n^{FP}(0, y, E) = \left[ \psi_0^{FP}(0, y, E) \quad \psi_1^{FP}(0, y, E) \quad \dots \quad \psi_N^{FP}(0, y, E) \right]^T. \quad (5.25)$$

Além disso,  $A_n$ ,  $B_n(s)$ , e  $C_n$  são matrizes expressas, respectivamente por

$$A_n = \begin{bmatrix} 1T_0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 9T_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 25T_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & (2N+1)^2 T_N \end{bmatrix}, \quad (5.26)$$

$$B_n(s) = \begin{bmatrix} 0 & 2s & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2s & 6\sigma_{tr} & 4s & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 4s & 30\sigma_{tr} & 6s & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2Ns & N(N+1)(2N+1)\sigma_{tr} \end{bmatrix}, \quad (5.27)$$

$$C_n = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 2 & 0 & 4 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 6 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2N-2 & 0 & 2N \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2N & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.28)$$

com  $\sigma_{tr}$  e  $T_n$  definidos pelas equações (5.13) e (5.21), respectivamente.  $\overline{\psi_n^{FP'}}(s, y, E)$  representa o vetor de  $N$  componentes das derivadas de  $\overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E)$  com respeito a variável  $y$  e é escrito como

$$\overline{\psi_n^{FP'}}(s, y, E) = \left[ \overline{\psi_0^{FP'}}(s, y, E) \quad \overline{\psi_1^{FP'}}(s, y, E) \quad \dots \quad \overline{\psi_N^{FP'}}(s, y, E) \right]^T. \quad (5.29)$$

A solução da equação (5.23) pode então ser expressa por

$$\overline{\psi_n^{FP}}(s, y, E) = c1(s) \cdot e^{-[B_n(s) \cdot A_n^{-1}]} + C_n \cdot [B_n(s)]^{-1} \cdot \psi_n^{FP}(0, y, E), \quad (5.30)$$

onde  $c1(s)$  é uma constante arbitrária a ser determinada a partir da aplicação das condições de contorno.

O fluxo angular pode então ser obtido aplicando a transformada inversa de Laplace à solução do problema transformado descrito pela equação (5.30), ou seja,

$$\psi_n^{FP}(x, y, E) = \mathfrak{L}^{-1} \left\{ c1(s) \cdot e^{-[B_n(s) \cdot A_n^{-1}]} \right\} + \mathfrak{L}^{-1} \left\{ C_n \cdot [B_n(s)]^{-1} \cdot \psi_n^{FP}(0, y, E) \right\}, \quad (5.31)$$

ou ainda,

$$\psi_n^{FP}(x, y, E) = \mathfrak{L}^{-1} \left\{ c1(s) \cdot e^{-[B_n(s) \cdot A_n^{-1}]} \right\} + C_n \cdot \mathfrak{L}^{-1} \left\{ [B_n(s)]^{-1} \right\} \cdot \psi_n^{FP}(0, y, E). \quad (5.32)$$

Uma vez obtidas as inversas das matrizes  $A_n$  e  $B_n(s)$ , isto é,  $A_n^{-1}$  e  $B_n(s)^{-1}$ , a transformada



inversa de Laplace no primeiro termo do segundo membro da equação (5.31) pode ser obtida através do uso da propriedade da convolução. Aqui, cumpre ressaltar, que não determinamos a inversa da matriz  $B_n(s)$  analiticamente, face à existência do parâmetro  $s$ , um parâmetro não numérico. Dessa forma, optamos por determinar a inversa da transformada de Laplace no segundo termo do segundo membro da equação (5.31) numericamente. No presente trabalho, foi considerado o método de inversão por quadratura de Gauss [Stroud, 1986], método que já se mostrou eficiente em outros trabalhos [Streck, 1993], [Davies e Martin, 1979].

No processo de deposição de energia há um interesse especial na avaliação da deposição local da energia dos elétrons em um meio. Sendo assim, abaixo, são definidas algumas quantidades e procedimentos que permitem determinar a quantidade de energia depositada num meio por elétrons.

### 5.3 Determinação da Dose Absorvida

Uma das nossas propostas, nesse trabalho, é a obtenção de uma expressão para o cálculo da quantidade de energia total depositada em um meio irradiado. Para isso, é necessário, além de saber a quantidade de dose imposta devido ao feixe de fótons, determinar a quantidade de dose devido ao elétron livre.

Sendo assim, para o cálculo da taxa de dose absorvida devido ao elétron livre, precisamos determinar o fluxo escalar, já que a dose é proporcional a este fluxo. O fluxo escalar de partículas é obtido a partir do fluxo angular, solução da equação (5.32), integrando-o nas direções  $\mu$  e  $\eta$ , isto é,

$$\psi(r, E) = \int_0^1 \int_{-1}^1 \psi(r, \mu, \eta, E) d\mu d\eta, \quad (5.33)$$

onde,

$$\mu = \cos \theta. \quad (5.34)$$

Conhecendo-se o fluxo escalar de partículas, a taxa de dose absorvida  $\dot{D}(r, E)$ , nas coordenadas espaciais de interesse  $r = (x, y)$ , é obtida usando-se a relação:

$$\dot{D}(r, E) = (S/\rho)_{col}\psi(r, E), \quad (5.35)$$

onde  $(S/\rho)_{col}$  denota o poder de parada de colisão (“collision stopping power”) do elétron no meio considerado em relação à massa.

A taxa de dose absorvida total devido ao elétron livre para diferentes energias em um meio material homogêneo ou heterogêneo, será a soma de todas as taxas de dose, para cada valor de energia considerado. Desta forma, a taxa de dose absorvida total devido ao elétron livre  $\dot{D}_{Te}(r)$ , nas coordenadas espaciais de interesse  $(x, y)$ , obtida em função do fluxo escalar, pode ser calculada pela expressão,

$$\dot{D}_{Te}(x, y) = \sum_{i=0}^M (S/\rho)_{col}^i \psi(x, y, E_i), \quad (5.36)$$

onde  $(S/\rho)_{col}^i$  denota o poder de parada de colisão (“collision stopping power”) do elétron no meio em relação à massa para a energia considerada  $E_i$ .

## CAPÍTULO 6

### RESULTADOS NUMÉRICOS PARA PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS

Neste capítulo, é obtida uma expressão para a taxa de dose absorvida total devido à radiação gama, onde a energia depositada pelo elétron livre, proveniente do espalhamento Compton, também é considerada. Além disso, são apresentados os resultados numéricos obtidos para a energia total depositada em domínios retangulares homogêneos de diferentes dimensões e composições.

Para alcançarmos esse objetivo dois problemas foram resolvidos: o primeiro para o transporte de fótons, assumindo como seção de choque diferencial o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo em energia; e o segundo, para o transporte de elétrons livres, considerando a seção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford. Os problemas são acoplados pela energia.

Para validação do método e dos códigos computacionais desenvolvidos, os resultados numéricos são comparados com os obtidos pelo programa Geant4 (versão 8) [Wright, 2001]; [Agostinelli et. al], que aplica a técnica de Monte Carlo para bibliotecas de baixa energia.

#### 6.1 Obtenção de uma Expressão para o Cálculo de Dose

Nesta seção é apresentada uma expressão para a taxa de dose absorvida total devido à radiação gama, onde a energia depositada pelo elétron livre, proveniente do espalhamento Compton, também é considerada.

A taxa de dose absorvida total pode ser obtida pela soma da taxa de dose absorvida total devido ao feixe de fótons com a taxa de dose total absorvida devido ao elétron livre, onde as taxas de doses absorvidas devido ao feixe de fótons e ao elétron livre são dadas respectivamente por

$$\dot{D}_{Tf}(x, y) = \sum_{i=0}^M \frac{\mu_{a_i}}{\rho} E_i \psi_i(x, y) \quad (6.1)$$

e

$$\dot{D}_{Te}(x, y) = \sum_{i=0}^M (S/\rho)_{col}^i \psi_i(x, y). \quad (6.2)$$

A seguir são apresentados os resultados numéricos obtidos para a energia total depositada no meio por fóton emitido. A energia total depositada é obtida em função da taxa de dose absorvida e do fluxo escalar de fótons, utilizando-se a seguinte conversão de unidades:

$$\left[ \frac{MeV}{\text{fóton}} \right] \left[ \frac{\text{fóton}}{cm^2 \cdot s} \right] \left[ \frac{cm^2}{g} \right] = \left[ \frac{MeV}{g \cdot s} \right]. \quad (6.3)$$

## 6.2 Problema-teste

Para ilustrarmos a aplicação do método, consideramos um feixe de fótons monoenergéticos com energia inicial de 1.25 MeV, incidindo perpendicularmente em um domínio retangular em  $(0, y)$ , com dimensões  $(x, y) \in [0, a] \times [0, b]$ , sujeito às seguintes condições de contorno,

$$I(0, y, \lambda_1) = 1, \text{ para } \mu > 0 \text{ e } \eta > 0, \mu > 0 \text{ e } \eta < 0, \quad (6.4)$$

$$I(0, y, \lambda_i) = 0, \text{ para } \mu > 0 \text{ e } \eta > 0, \mu > 0 \text{ e } \eta < 0 \text{ e } i = 2, 3, \dots, M. \quad (6.5)$$

As demais fronteiras estão sujeitas às condições de vácuo. Aqui, cumpre ressaltar que para o problema de transporte de elétrons também são consideradas as condições de contorno dadas por,

$$\psi(0, y, E_i) = \frac{\mu_{li}}{\rho}, \text{ para } \mu > 0 \text{ e } \eta > 0, \mu > 0 \text{ e } \eta < 0, \quad (6.6)$$

$$\psi(a, y, E_i) = 0, \text{ para } \mu < 0 \text{ e } \eta > 0, \mu < 0 \text{ e } \eta < 0, \quad (6.7)$$

$$\psi(x, 0, E_i) = 0, \text{ para } \mu > 0 \text{ e } \eta > 0, \mu < 0 \text{ e } \eta > 0, \quad (6.8)$$

$$\psi(x, b, E_i) = 0, \text{ para } \mu < 0 \text{ e } \eta < 0, \mu > 0 \text{ e } \eta < 0, \quad (6.9)$$

com  $i = 1, 2, 3, \dots, M$  e  $\mu_{li}/\rho$  o coeficiente de atenuação linear da radiação gama para o meio e a energia  $E_i$  considerados.

Os fótons incidentes são acompanhados até depositarem toda a sua energia e/ou saírem do meio de interesse. Nesse estudo também é levada em conta a deposição de energia dos elétrons secundários gerados através do efeito Compton.

Os algoritmos foram implementados para meios retangulares de diferentes dimensões e compostos homogeneamente por água, tecido mole ou osso. Os coeficientes de atenuação e absorção e o poder de parada de colisão em função da energia e do meio foram obtidos no site <http://www.physics.nist.gov/> e são apresentados no apêndice II deste trabalho.

Os algoritmos foram testados, com ordem de quadratura  $N = 4, 6$  e  $8$ , para o problema de transporte de fótons, onde utilizamos o conjunto de quadratura angular com simetria de nível, dado por [Lewis e Miller, 1984]. E para o problema de transporte de elétrons, onde foi usada a aproximação  $P_N$ ,  $N = 1, 3, 5, 7$  e  $9$ .

Obtivemos resultados numéricos para 3 e 5 valores de energia ( $M = 3$  e  $M = 5$ ). Além disso, a inversão numérica da transformada de Laplace por quadratura de Gauss foi aplicada na solução da equação de transporte de elétrons (5.32) utilizando-se 8 pontos de quadratura.

Nas Tabelas 6.1, 6.2 e 6.3 apresentamos os valores numéricos obtidos para a energia

depositada pelo elétron livre pela técnica proposta nesse trabalho e comparações com os resultados obtidos pelo programa Geant4 (versão 8) [Hoff, 2007]. Analisando os resultados apresentados nas Tabelas 6.1, 6.2 e 6.3, considerando que aqueles obtidos pelo programa Geant4 são gerados para modelos de um grupo de energia, podemos afirmar que eles apresentam uma boa coincidência. Na verdade, a variação apresentada pode estar associada ao fato de termos usado a equação de Fokker-Planck para simular o transporte de elétrons. Ou ainda, para o caso da Tabela 6.3, onde o meio é composto por osso, à produção de outros efeitos, envolvendo elétrons secundários, que não foram considerados neste trabalho.

Dimensões do retângulo	<i>Água</i>		
	Aproximação $P_9$	Geant4	Variação percentual
10cm x 10cm	0.02149855	0.02289237	6.0885%
10cm x 20cm	0.02100552	0.02240557	6.2487%
20cm x 10cm	0.01845323	0.01971250	6.3882%
20cm x 20cm	0.03378688	0.03609384	6.3916%
30cm x 40cm	0.04580598	0.04893386	6.3921%

Tabela 6.1 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por água

Dimensões do retângulo	<i>Tecido Mole (ICRU44)</i>		
	Aproximação $P_9$	Geant4	Variação percentual
20cm x 10cm	0.02288590	0.02440210	6.2134%
20cm x 20cm	0.03317010	0.03542490	6.3650%
30cm x 40cm	0.04951665	0.05288919	6.3766%

Tabela 6.2 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por tecido mole (ICRU44)

Na Tabela 6.4 apresentamos a convergência numérica dos resultados obtidos pelo

emprego da aproximação  $P_N$  para  $N$  crescente. De fato, observando os resultados obtidos para  $N = 7$  e  $N = 9$  percebemos a concordância em 4 dígitos significativos.

Nas Tabelas 6.5, 6.6 e 6.7 são apresentadas os valores para a energia depositada em retângulos homogêneos de diferentes dimensões sem considerar a energia depositada pelo elétron livre.

Pela análise dos resultados apresentados nas Tabelas 6.5, 6.6 e 6.7 podemos observar uma boa concordância entre os encontrados pela metodologia proposta neste trabalho e aqueles obtidos pela técnica de Monte Carlo.

Na Tabela 6.8 apresentamos a convergência numérica dos resultados obtidos pelo método  $LTS_N$  nodal para  $N$  crescente. De fato, observando os resultados obtidos para  $N = 6$  e  $N = 8$  percebemos a concordância em 3 dígitos significativos. Aqui, vale lembrar que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto para os fluxos angulares médios na fronteira e o erro de arredondamento.

Os resultados gerados pelo programa Geant4 foram implementados considerando-se uma espessura de 0.1nm. Foram considerados ainda  $10^4$ ,  $10^5$  e  $10^6$  fótons.

A comparação entre os valores encontrados pela formulação proposta e os resultados gerados pelo programa Geant 4, usados como referenciais, mostra uma concordância cuja variação máxima obtida é inferior a 9% para o problema de transporte de elétrons e inferior a 4% para o problema de transporte de fótons. Os resultados que apresentaram variações maiores foram para a energia depositada pelo elétron livre e/ou para meios formados por osso. Acreditamos que essa variação acumulada na obtenção das soluções deve-se ao arredondamento nas operações aritméticas e ao uso da equação de Fokker-Planck, uma aproximação para a equação de transporte de Boltzmann, para o transporte de elétrons. A variação apresentada nos resultados para meios composto por osso indicam que outros efeitos devem ser considerados na formulação. Devido à maior densidade do osso, aumenta o número de interações e a possibilidade da produção de outros processos envolvendo elétrons secundários.

Devemos mencionar ainda que os cálculos utilizando-se o método  $LTS_N$  nodal e a aproximação  $P_N$  foram realizados utilizando-se um microcomputador AMD Athlon 1700 (1.4 GHz). Enquanto que o programa Geant 4 foi implementado em um microcomputador Pentium 4 (Intel) - CPU 2.8GHz, 1G HD. Os tempos computacionais observados para gerar

os resultados pelos métodos propostos neste trabalho estão registrados nas tabelas 6.9 e 6.10. É importante ainda ressaltar que o tempo computacional observado para gerar os resultados pela técnica de Monte Carlo foi em média de dois dias.

Os valores numéricos, para os problemas apresentados, foram obtidos com a implementação dos algoritmos no programa Fortran 90, utilizando-se precisão dupla. Esses resultados foram determinados com o auxílio de rotinas numéricas do pacote IMSL.

	<i>Ossos (ICRU44)</i>		
Dimensões do retângulo	Aproximação $P_9$	Geant 4	Variação percentual
20cm x 10cm	0.83789957	0.91244397	8.1697%
20cm x 20cm	0.79284239	0.86380422	8.2150%
30cm x 40cm	0.89218297	0.97249263	8.2581%

Tabela 6.3 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte] pelo elétron livre num retângulo homogêneo composto por osso (ICRU44)

$N$	<i>Energia depositada pelo elétron</i>
1	0.02590432
3	0.03199219
5	0.03252043
7	0.03370622
9	0.03378688

Tabela 6.4 – Convergência numérica da aproximação  $P_N$  para um retângulo 20 cm x 20 cm homogêneo composto por água



	<i>Água</i>		
Dimensões do retângulo	LTS <sub>8</sub> nodal	Geant 4	Variação percentual
10cm x 10cm	0.00298551	0.00304630	1.9955%
10cm x 20cm	0.00594042	0.00606202	2.0059%
20cm x 10cm	0.00120395	0.00122915	2.0502%
20cm x 20cm	0.00585222	0.00597681	2.0845%
30cm x 40cm	0.00837496	0.00855399	2.0929%

Tabela 6.5 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte]  
num retângulo homogêneo composto por água

	<i>Tecido Mole (ICRU44)</i>		
Dimensões do retângulo	LTS <sub>8</sub> nodal	Geant 4	Variação percentual
20cm x 10cm	0.00217469	0.00221796	1.9509%
20cm x 20cm	0.00966018	0.00986673	2.0934%
30cm x 40cm	0.01343034	0.01372775	2.1665%

Tabela 6.6 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte]  
num retângulo homogêneo composto por tecido mole  
(ICRU44)

	<i>Osso (ICRU44)</i>		
Dimensões do retângulo	LTS <sub>8</sub> nodal	Geant 4	Variação percentual
20cm x 10cm	0.12279419	0.12594990	2.4261%
20cm x 20cm	0.23779116	0.24449431	3.1506%
30cm x 40cm	0.34551587	0.35676863	3.1541%

Tabela 6.7 – Energia depositada em [eV/fótons emitidos pela fonte]  
num retângulo homogêneo composto por osso (ICRU44)

$N$	<i>Energia depositada sem considerar o elétron livre</i>
2	0.0070012
4	0.0065073
6	0.0059405
8	0.0058522

Tabela 6.8 – Convergência numérica do método  $LTS_N$  nodal para um retângulo 20 cm x 20 cm homogêneo composto por água

<i>Ordem da Quadratura - Aproximação <math>P_N</math></i>	<i>Tempo Computacional(min)</i>
3	6.2
5	10.3
7	19.6
9	30.0

Tabela 6.9 – Tempo de execução computacional para a aproximação  $P_N$

<i>Ordem da Quadratura - <math>LTS_N</math> nodal</i>	<i>Tempo Computacional(min)</i>
4	6.42
6	25.9
8	125

Tabela 6.10 – Tempo de execução computacional para o método  $LTS_N$  nodal

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSÕES

Propomos no presente trabalho obter uma solução analítica para a equação de transporte de Boltzmann em duas dimensões, considerando espalhamento Compton simulado pela seção de choque de Klein-Nishina e modelo multigrupo, bem como uma expressão para o cálculo de dose total devido à radiação gama. Isso foi de fato obtido aplicando-se o método  $LTS_N$  nodal bidimensional na equação de transporte de fótons e a aproximação  $P_N$  na solução da equação de Fokker-Planck para o transporte de elétrons.

A principal vantagem do método apresentado reside no fato de possibilitar a extensão da formulação  $LTS_N$  nodal para a solução da equação de transporte de Boltzmann considerando a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo. Além disso, em se tratando da questão de analiticidade, devemos enfatizar que a única aproximação feita ao longo desta solução foi para os fluxos angulares médios na fronteira. Devemos ainda ressaltar, que a formulação apresentada representa uma nova aplicação do método  $LTS_N$  nodal bidimensional. Pois, até então, em nosso conhecimento, este método ainda não havia sido aplicado na solução da equação de transporte assumindo a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo. Antes disso, a solução  $LTS_N$  era restrita a problemas de transporte que envolviam espalhamento isotrópico ou anisotrópico. Sendo assim, a partir deste trabalho, o método  $LTS_N$  nodal pode ser considerado como um método ainda mais abrangente, no sentido que ele pode ser aplicado a um grupo mais diverso de problemas.

A partir da análise dos resultados obtidos, as principais contribuições originadas durante o desenvolvimento deste trabalho podem ser resumidas em:

- Obtenção de resultados benchmark para o fator de build-up de exposição para o problema de transporte de fótons em uma placa plana, assumindo a seção de choque de

espalhamento diferencial de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo. Esta afirmativa está fundamentada na já provada convergência do método  $LTS_N$  e no caráter analítico da solução, no sentido que nenhuma aproximação é feita ao longo de sua derivação a partir das equações  $S_N$ , exceto para o erro de arredondamento.

- Extensão da formulação  $LTS_N$  nodal para o problema de transporte de fótons em um retângulo considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina bem como modelo multigrupo em energia.

- Obtenção de uma boa concordância, com os resultados gerados pela técnica de Monte Carlo, através de um esforço computacional pequeno. Isso nos permite afirmar que o método proposto é um método promissor e pode ser considerado uma ferramenta útil para a variedade de aplicações que requerem a resolução de problemas que envolvam o transporte de partículas, entre eles a determinação de parâmetros e grandezas importantes na área de proteção radiológica: cálculo e análise de blindagens e dosimetria das radiações.

- Obtenção de uma solução analítica para a aproximação  $P_N$  da equação de Fokker-Planck para o transporte de elétrons em um retângulo.

Pelo exposto, é entendido que os objetivos deste trabalho tenham sido alcançados. Outras perspectivas de continuidade e aplicações incluem a modelagem do problema para o transporte de fótons em meios heterogêneos formados por elementos de alto número atômico e alta densidade, com a incorporação de termos que simulem outros efeitos, além do espalhamento Compton, na equação de transporte; a extensão da solução  $LTS_N$  nodal para problemas em meios heterogêneos e para problemas tridimensionais assumindo o já mencionado kernel de espalhamento bem como modelo multigrupo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agostinelli S. et al., 2003. “Geant4 - A Simulation Toolkit”, **Nuclear Instruments and Methods A**, vol. 506, pp. 250–303.

J. Allison et al., 2006. “Geant4 Developments and Applications”, **IEEE Transactions on Nuclear Science**, vol. 53(1), pp. 270–278.

Atkinson, K. E., 1988. “**An Introduction to Numerical Analysis**”. John Wiley and Sons, New York.

Barichello, L. B. and Vilhena, M. T., 1993. “A general analytical approach to one group one dimensional transport equation”, **Kerntechnik**, vol. 58(5), pp.182.

Barros, R. C., Cardona, A. V. and Vilhena M. T., 1996. “Analytical Numerical Methods Applied to Linear Discontinuous Angular Approximations of the Transport Equation in Slab Geometry”, **Kerntechnik**, vol. 61(2-3), pp. 11–116.

Barros, R. C. and Larsen, E. W., 1991. “A Spectral Nodal Method for the Solution of the  $S_N$  Equations in X,Y-Geometry for Highly Absorbing Deep Penetration Problems”, **VIII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo-hidráulica**, vol. 1(1), pp. 423–428.

Barros, R. C. and Larsen, E. W., 1992. “A Spectral Nodal Method for One-group X,Y-geometry Discrete Ordinates Problems”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 111(134), pp. 34–45.

Barros, R. C. and Mello, J. A. M., 2002. “An Exponential Spectral Nodal Method for One-Speed X,Y-geometry Deep Penetration Discrete Ordinates Problems”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29(15), pp. 1855–1869.

Batistela, C. H. F., 1997. “**Estudo de criticalidade pelo método LTSn**”, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil, 1997.

Batistela, C. H. F., Vilhena M. T. and Borges V., 1997. “Criticality by the  $LTS_N$  method”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol.34, pp. 603.

Bell G. I. and Glastone S., 1985. “**Nuclear Reactor Theory**”. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida.

Borges, V. and Derivi A. G., 2001. “Determination of the criticality parameters in heterogeneous slab by the  $LTS_N$  method’, **Proceedings of International Conference on Computational Heat and Mass Transfer**, Rio de Janeiro, Brasil.

Börjes, C. and Larsen E. W., 1996. “Asymptotic Derivation of the Fermi Pencil-Beam Approximation”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 123, pp. 343.

Börjes, C. and Larsen E. W., 1996. “On the accuracy of the Fokker-Planck and Fermi pencil beam equations for charged particle transport”, **Medical Physics**, vol. 23 (10), pp. 1749–1759.

Brancher, J., Segatto, C. and Vilhena, M. T., 1999. “The  $LTS_N$  solution for radiative transfer problem without azimuthal symmetry with severe anisotropy”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 62, pp.743.

Cardona, A. V., 1996. “**Método Genérico da Solução Analítica para as Aproximações da Equação Linear de Transporte**”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Cardona, A. V., Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1996. “Solução da Equação Bidimensional de Transporte pelo Método  $LTCh_N$ ”, **VI CEGEN - VI Congresso Nacional de Energia Nuclear**, Rio de Janeiro, RJ.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1993. “As Funções de Walsh e sua Aplicação na Solução da Equação de Transporte de Nêutrons”, **Anais do IX-ENFIR - Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica**, Caxambu, MG, pp.37–41.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1994. “A Solution of Linear Transporte Equation Using Walsh Function and Laplace Transform”, **Anals of Nuclear Energy** vol.21(8), pp.495–505.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1994. “A Solution of Linear Transporte Equation Using Chebyshev Polynomials and Laplace Transform”, **Kerntechnik** vol.59(6), pp.278–281.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1995. “Solução Analítica da Aproximação  $A_N$  da Equação de Transporte Linear com Simetria Planar”, **Anais do X-ENFIR - Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica**, Águas de Lindóia, SP, pp.528–531.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1997. “Analytical Solution for  $A_N$  Approximation”, **Progress in Nuclear Energy** vol.31(3), pp.219–223.

Case, K. M., 1960. “Elementary Solutions of the Transport Equation and their Applications”, **Annals of Physics**, vol. 9, pp. 1–23.

Case, K. M. and Zweifel, P. F., 1967. “**Linear Transport Theory**”. Addison-Wesley Publishing Company, Inc.

Davies, B. and Martin, B., 1979. “Numerical Inversion of the Laplace Transform: A Survey and Comparison of Methods”, **Journal of Computational Physics**, vol. 33, pp. 1–32.

Eyges, L., 1948. “Multiple Scattering with Energy Loss”, **Physical Review**, vol. 74, pp. 1534–1535.

Fermi, E., 1941. citado por B. Rossi e K. Griesen em “Cosmic Ray Theory”, **Rev. Mod. Phys**, vol. 13, pp. 265.

Fitzgerald J. J., Brownell, G.L. and Mahoney F. J. , “**Mathematical Theory of Radiation Dosimetry**”. Gordon and Breach, New York, USA.

Goudsmit S. and Saunderson J. L. , 1940. “Multiple Scattering of Electrons”, **Physical Review**, vol. 57, pp. 24–29.

Hauser, E. B., 2002. “**Estudo e Solução da Equação de Transporte de Nêutrons Bidimensional pelo Método  $LTS_N$  para Elevadas Ordens de Quadraturas Angulares:  $LTS_N$  2D-Diag e  $LTS_N$  2D-DiagExp**”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Hirayama H., 1995. “Calculation of Gamma-Ray Exposure Buildup Factors up to 40 mfp using the EGS<sub>4</sub> Monte Carlo Code with a Particle Splitting”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 32(12), pp. 1201–1207.

Hirayama H. and Shin K., 1998. “Application of the EGS<sub>4</sub> Monte Carlo Code to a Study of Multilayer Gamma-Ray Exposure Buildup Factors”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 35(11), pp. 816–829.

Hoff G., 2007. Comunicação Pessoal, Faculdade de Física/PUCRS, Porto Alegre, RS, Brasil.

International Commission on Radiation Units and Measurements, 1984. “**Radiation Dosimetry: Electron Beams with Energies between 1 and 50 MeV**”. Bethesda, Maryland.

Ito S., 1972. “A New Method for Analysis os Pulsed Fast Newton Experiments”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 49, pp. 548–567.

Jette D. and Lanzl L. H. and Rosenfeld M. , 1983. “The Application of Multiple Scattering Theory to the Therapeutic Electron Dosimetry”, **Medical Physics**, vol. 18(1), pp. 141–146.

Jette D., 1988. “Electron Dose Calculation Using Multiple-Scattering Theory. A Gaussian Multiple Scattering Theory”, **Medical Physics**, vol. 15(2), pp. 123–137.

Johns, H. E. and Cunningham, J. R., 1983. “**The Physics of Radiology**”. Thomas Springfield Press, Illinois.

Keall, P. J., 1993. “**Electron Transport in Photon and Electron Beam Modelling**”, Tese de doutorado, Universidade de Adelaide, Adelaide, Austrália.



Klevenhagen, S. C., 1985. **“Physics of Electron Beam Therapy”**. Adam Hilger Ltd, London, UK.

Klevenhagen, S. C., 1993. **“Physics and Dosimetry of Therapy Electron Beams”**. Medical Physics Publishing, Madison, Wisconsin, USA.

Kreider, D. L., 1966. **“An Introduction to Linear Analysis”**. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Massachusetts, USA.

Kuscer, I. and Zweifel, P. F., 1965. “Time dependent one-speed albedo problem for a semi-infinite medium”, **Journal of Mathematical Physics**, vol. 6, pp. 1125–1130.

Larsen, E. W., Vasques, R. and Vilhena M. T., 2005. “Particle transport in the 1-D diffusive atomic mix limit”, **Mathematics and Computation, Supercomputing, reactor Physics and Nuclear and Biological Applications**, France.

Leakeas C. L. and Larsen E. W., 2001. “Generalized Fokker-Planck Approximations of Particle Transport with Highly Forward-Peaked Scattering”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 137, pp. 326.

Lewis E. E. and Miller W. F., 1984. **“Computational Methods of Neutron Transport”**. Wiley, New York, USA.

Lunelli, R., 2002. **“Solução da Equação de Transporte de Fótons para uma Placa Heterogênea, Modelo de Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina”**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada (PPGMA<sub>p</sub>), Porto Alegre, RS, Brasil.

Mello, J. A. M., 2000. **“Modelagem Espectro-Nodal Exponencial para Problemas Monoenergéticos de Penetração Profunda Segundo a Teoria de Transporte de Nêutrons na Formulação de Ordenadas Discretas em Geometria Cartesiana Bidimensional”**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

McKinley W. A. and Feshback H., 1948. **Physical Review**, vol. 74, pp. 1759.

Molière G., 1947. “Theorie die Strueung Schneller Geladenner Teilchen I: Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb field”, **Z. Naturforsch**, vol. 2a, pp. 133–145.

Molière G., 1948. “Theorie die Strueung Schneller Geladenner Teilchen II: Mehrfach and Vielfachstreuung”, **Z. Naturforsch**, vol. 3a, pp. 78–97.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T., 2000. “Convergence in transport theory”, **Applied Numerical Mathematics**, Vol. 30, pp.79.

Pazos R. P., Hauser E. B. and Vilhena M. T., 2003. “Advances in the solution of three-dimensional nodal neutron transport equation”, **11th International Conference on Nuclear Engineering**, Tokyo.

Pomraning G. C., 1992. “The Fokker-Planck operator as an asymptotic limit”, **Math. Mod. Meth. Appl. Science**, vol. 2(1), pp. 21.

Pomraning G. C., 1996. “Higher Order Fokker-Planck Operators”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 124, pp. 390.

Pomraning G. C., Prinja A. K. and VanDenburg J. W., 1992. “An Asymptotic Model for the Spreading of a Collimated Beam”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 112, pp. 347.

Prinja, A. K. and Pomraning G. C., 2001. “A Generalized Fokker-Planck Model for Transport of Collimated Beams”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 137, pp. 227–235.

Rodriguez B. A., Vilhena M. T. and Borges V., 2006. “The Determination of the Exposure Buildup Factor Formulation in a Slab Using the  $LTS_N$  Method”, **Kerntechnik**, vol. 71, pp. 182–184.

Rodriguez B. A., Vilhena M. T. and Borges V., 2007. “Formulação semi-analítica para o fator de build-up em uma placa plana e um retângulo ”, **Proceedings of Cilamce - Métodos Numéricos e Computacionais em Engenharia**, Cidade do Porto, Portugal, pp. 333.

Sauer, L. Z., 1997. **“Solução da Equação de Transporte Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina: Uma Aplicação ao Cálculo de Dose”**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada (PPGMA<sub>p</sub>), Porto Alegre, RS, Brasil.

Scaff, L. A. M., 1997. **“Física da Radioterapia”**. Sarvier, São Paulo.

Schwartzmann, G., 1991. **“Oncologia Clínica: Princípios e Prática”**. Editora Artes Médicas, Porto Alegre.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T. M. B., and Gomes, M. G., 1999. “The One- Dimensional  $LTS_N$  Solution In a Slab With High Degree of Quadrature”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 925–934.

Simch, M. R. R., 2004. **“Solução  $LTS_N$  para Problemas de Transferência Radiativa com Polarização em Geometria Plana”**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Porto Alegre, RS, Brasil.

Strang, G., 1988. **“Linear algebra and its applications”**. Harcourt Brace Jovanovich College Publishers, Fort Worth, Texas.

Streck, E. E., 1993. **“Solução Analítica para a Aproximação  $P_N$  da Equação de Transporte Linear Unidimensional”**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Porto Alegre, RS, Brasil.

Stroud A. H. and Secrest, D., 1986. **“Gaussian Quadrature Formulas”**. Prentice Hall Inc., New Jersey, USA.

Trindade, L. B., 1997. **“Cálculo da Dose pelo Método  $LTP_N$  Aplicado à Equação de Boltzmann Unidimensional para Fótons em Valores Discretos de Energia”**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Porto Alegre, RS, Brasil.

Vasques, R., Segatto, C. F. and Vilhena M. T., 2003. “The  $LTS_N$  solution for the neutron transport equation in spherical geometry, **Proceedings of 18<sup>th</sup> International Conference on Transport Theory**, Rio de Janeiro, pp. 265.

Velho, H., Retamoso, M. and Vilhena, M. T., 2003. “Inverse problems for estimating bottom boundary conditions of natural waters in engineering”, **International for Numerical Methods in Engineering**, vol. 54, pp. 1357.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1991. “The  $LTS_N$  method: a new analytical approach to solve the neutron transport equation”, **Kerntechnik**, vol. 56(5), pp. 334.

Vilhena, M. T. and Streck E., 1992. “An Approximated Analytical Solution for the One-Group Neutron Transport Equation”, **Kerntechnik**, vol. 57,(3) pp. 196–198.

Vilhena, M. T. and Segatto, C. F. “A new iterative method to solve the radiative transfer equation”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 55, pp. 493.

Vilhena M. T. M. B, Barichello L. B., Zabadal J., Segatto, C. F. and Cardona A. V., 1998. “General Solution of the One-Dimensional Approximations to the Transport Equation”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33(1-2), pp. 99–115.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1995. “An analytical solution for the multigroup slab geometry discrete ordinates problems”, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 24, pp. 1337.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1999. “A closed-form solution to one-dimensional liner and nonlinear radiative transfer Problem’, **Hybrid Methods in Engineering**, vol. 1, pp. 1.

Wright D. H., 2001. Physics Reference Manual.

Zabadal, J., 1994. “**Solução Analítica da Equação de Ordenadas Discretas Multidimensional**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Zabadal J., Vilhena M. T. M. B and Barichello L. B., 1995. “Solution of the Three-Dimensional One-Group Discrete Ordinates Problem by the  $LTS_N$  Method”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 22(2), pp. 131–134.

Zabadal J., Vilhena M. T. M. B and Barichello L. B., 1997. “An Analytical Solution for the Two-Dimensional Discrete Ordinates in a Convex Domain”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 31(3), pp. 225–228.

Zerby, C. D. and Keller, F. L., 1967. “Electron Transpot Theory, Calculations, and Experiments”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 27, pp. 190–218.

## APÊNDICE I

### OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE PARA FÓTONS E RADIAÇÃO GAMA

Para descrever completamente o movimento de partículas neutras num meio é utilizada uma equação que fundamentalmente descreve um balanço de partículas num elemento de volume no espaço de fase  $(r, E, \Omega)$ . Assim, neste capítulo, é deduzida, na sua forma geral, a equação governante para o transporte de fótons através da matéria.

Primeiramente, assumimos que os problemas sejam estacionários. A descrição desse processo envolve  $N$  partículas neutras em 6 dimensões do espaço de fase: 3 dimensões espaciais, 2 componentes de direção  $(\bar{\Omega})$  e uma componente de energia. Nesse espaço de fase, usaremos o elemento infinitesimal de volume dado por  $dv = dV d\Omega dE$ . Uma partícula nesse elemento de volume, nesse espaço de fase está no elemento de volume  $dV$  e está viajando na direção  $d\bar{\Omega}$  em torno de  $\bar{\Omega}$ , com energia  $E$  que varia de  $E$  a  $dE$ .

Para estabelecer a equação de transporte, devemos discutir os processos que influenciam o nosso sistema.

Dois processos podem fazer com que a partícula deixe o elemento de volume  $dv$ , um deles é a convecção espacial fora do espaço de volume  $dV$  e o outro, uma colisão que tira a partícula de  $d\Omega dE$ .

Considerando a convecção espacial, a perda do volume  $dV$  é representada pelo divergente do número da densidade de corrente. Basicamente, isso é justamente a definição matemática de divergente. O número da densidade de corrente para as partículas no volume  $dv$  é  $\bar{\Omega}N(r, E, \bar{\Omega})d\Omega dE$  e  $dV$  é o elemento de volume infinitesimal espacial sobre o ponto  $r$ . Conseqüentemente, a taxa de perda de partículas resultante da convecção espacial fora de  $dV$  é,

$$div \cdot (\bar{\Omega} N d\Omega dE) dV = \nabla \cdot (\bar{\Omega} N d\Omega dE) dV. \quad (I.1)$$

O número de partículas perdidas de  $dv$  devido às colisões que removem partículas de  $d\Omega dE$  é igual ao número de partículas sofrendo interações em  $dv$ , isto é,

$$\mu_l (N d\Omega dE) dV, \quad (I.2)$$

onde  $\mu_l$  representa o coeficiente de atenuação linear.

Partículas podem entrar em  $dv$  de duas maneiras: sendo produzidas dentro do próprio  $dv$ , ou sendo espalhadas para  $d\Omega dE dV$  de um outro elemento de volume. As partículas produzidas dentro de  $dv$  são representados por um termo de fonte,

$$s(r, E, \bar{\Omega}) dV d\Omega dE, \quad (I.3)$$

onde  $s$  representa o número de partículas criadas por unidade de tempo em  $r$  que movem-se na direção  $\bar{\Omega}$  por unidade de ângulo sólido com energia  $E$  por unidade de alcance de energia.

Para estabelecer uma expressão que descreva o ganho de partículas em  $dv$  pelo espalhamento de outro elemento de volume para  $d\Omega dE dV$  (“inscattering”), devemos definir uma seção de choque diferencial da direção  $\bar{\Omega}'$  para  $\bar{\Omega}$  e de  $E'$  para  $E$  por unidade de ângulo sólido e por unidade de intervalo de energia. Essa seção de choque diferencial é representada por  $\sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E)$ .

O número de colisões de espalhamento por unidade de tempo em  $dV$  nas quais as partículas são espalhadas de  $\bar{\Omega}' dE'$  em  $\bar{\Omega} dE$  é dado por,

$$ndV (\sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E) \bar{\Omega} dE [N(r, E', \bar{\Omega}') d\Omega' dE']), \quad (I.4)$$

onde  $\alpha$  é o número de partículas espalhadas por unidade de volume em  $r$ . (Para o espalhamento Compton de fótons  $\alpha = Z N_A \sigma_T \rho / A$ , o número de elétrons por centímetro cúbico. Para espalhamento de nêutrons  $\alpha = N_A \sigma_T \rho / A$ , o número de núcleos por centímetro cúbico.)

Para a taxa total de “inscattering”, a expressão (I.4) deve ser integrada sobre todo  $E'$  e  $\bar{\Omega}'$ . Quando juntamos todas as expressões, a equação de transporte fica dada por,

$$\nabla \cdot \bar{\Omega} N(r, E, \bar{\Omega}) + \mu_l N(r, E, \bar{\Omega}) = \int \int N(r, E', \bar{\Omega}') \alpha \sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E) dE' d\Omega' + s(r, E, \bar{\Omega}). \quad (\text{I.5})$$

Reescrevendo a equação (I.5) em termos de densidade de fluxo em energia, isto é, multiplicando a equação por  $E$ , temos,

$$\nabla \cdot \bar{\Omega} I(r, E, \bar{\Omega}) + \mu_l I(r, E, \bar{\Omega}) = \int \int I(r, E', \bar{\Omega}') \alpha \sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E) \frac{E dE'}{E'} d\Omega' + S(r, E, \bar{\Omega}), \quad (\text{I.6})$$

onde  $S = Es$  é a densidade fonte-energia, a energia de partículas criadas em unidade de tempo em  $r$  que estão movendo-se na direção  $\bar{\Omega}$  por unidade de ângulo sólido com energia  $E$  por unidade de alcance de energia.

Em se tratando de fótons, podemos utilizar o espalhamento Compton para relacionar  $E'$ ,  $E$  e o ângulo de espalhamento  $\bar{\Omega}$ . Esta relação pode ser dada por,

$$\lambda - \lambda' = (1 - \cos \theta), \quad (\text{I.7})$$

onde os comprimentos de onda dos fótons estão escritos em termos de  $h/m_e c$  e  $\lambda'$  refere-se ao comprimento de onda do fóton incidente e  $\lambda$  ao comprimento de onda do fóton espalhado. O ângulo  $\theta$  é formado por  $\bar{\Omega}$  e  $\bar{\Omega}'$ ; conseqüentemente,  $\cos \theta = \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}'$ . Assim a equação (I.7) pode ser escrita como,

$$\lambda - \lambda' = (1 - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}'). \quad (\text{I.8})$$

Para incorporar a condição dada pela equação (I.8) na equação (I.6) podemos fazer o uso da função generalizada delta de Dirac com as seguintes propriedades,



$$\frac{[\delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')] }{E^2} = \begin{cases} 0 & (\lambda - \lambda') \neq (1 - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \\ \infty & (\lambda - \lambda') = (1 - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \end{cases} \quad (\text{I.9})$$

e tal que,

$$\int_0^\infty [\delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')] \frac{dE}{E^2} = 1. \quad (\text{I.10})$$

Usando essa função generalizada de delta, podemos caracterizar a seção de choque diferencial, construindo-a dentro da definição de espalhamento Compton relacionando  $E'$ ,  $E$  e  $\bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}'$ , isto é,

$$\sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E) = \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \frac{\delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}')}{E^2}. \quad (\text{I.11})$$

Integrando a expressão (I.11) em  $E$ , obtemos,

$$\int \sigma(\bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}; E' \rightarrow E) dE = \int \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \frac{dE}{E^2} = \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}'). \quad (\text{I.12})$$

Incorporando a equação (I.11) na equação (I.6) e considerando a mudança de variável de  $E'$  para  $\lambda'$ , obtemos a seguinte expressão,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\bar{\Omega} I(r, E, \bar{\Omega})] + \mu_l I(r, E, \bar{\Omega}) &= \int_0^\lambda d\lambda' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' I(r, \lambda', \bar{\Omega}') \frac{\alpha \lambda}{\lambda'} \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \times \\ &\times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') + S(r, \lambda, \bar{\Omega}). \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

Podemos ainda usar a seguinte substituição,

$$k(\lambda', \lambda) = 2\pi \frac{\lambda}{\lambda'} \sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \quad (\text{I.14})$$

resultando em,

$$\nabla \cdot [\bar{\Omega}I(r, E, \bar{\Omega})] + \mu_l I(r, E, \bar{\Omega}) = \int_0^\lambda d\lambda' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' I(r, \lambda', \bar{\Omega}') \frac{\alpha k(\lambda', \lambda)}{2\pi} \times \\ \times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') + S(r, \lambda, \bar{\Omega}). \quad (\text{I.15})$$

A função  $k(\lambda', \lambda)$  pode ser escrita explicitamente em termos de  $\lambda'$  e  $\lambda$  se empregarmos a equação (I.7), que expressa a troca no comprimento de onda como uma função do ângulo de espalhamento, e da fórmula de Klein-Nishina para seção de choque diferencial dada por,

$$\sigma(\lambda', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') = \frac{3}{16\pi} \frac{(\lambda')^2}{\lambda^2} \left( \frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} - \sin^2 \theta \right). \quad (\text{I.16})$$

Com essas substituições  $k(\lambda', \lambda)$  pode ser escrita como,

$$k(\lambda', \lambda) = \begin{cases} \frac{3}{8} \frac{\lambda'}{\lambda} \left[ \frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} + 2(\lambda' - \lambda) + (\lambda' - \lambda)^2 \right] & (\lambda' < \lambda < \lambda' + 2) \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases} \quad (\text{I.17})$$

A equação (I.15) é a equação de Boltzmann íntegro-diferencial para a densidade de fluxo para raios gama e fótons. Ela descreve a densidade de fluxo total, isto é, o que foi espalhado e o que não foi espalhado (“scattered” e “unscattered”). Essa equação é a base de todos os cálculos em dosimetria de radiação gama. Ela sofrerá modificações dependendo da fonte e da geometria considerada.

## APÊNDICE II

### TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO

Neste apêndice são apresentados os valores dos coeficientes de atenuação ( $\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ ) da água, ferro e chumbo utilizados no capítulo 3 e os coeficientes de atenuação ( $\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ ) e absorção ( $\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}$ ) e poder de parada de colisão ( $(S/\rho)_{col}$ ) da água, tecido mole e osso utilizados no capítulo 6, para as energias de interesse. Esses coeficientes foram obtidos a partir dos dados apresentados por [Hirayama e Shin, 1998] para o problema em uma dimensão e a partir do site <http://www.physics.nist.gov/> para os problemas em duas dimensões. Também é apresentada uma tabela com os dados dos meios materiais considerados.

Tabela II.1 – Coeficientes de atenuação [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1 MeV.

$E_j$ [MeV]	$\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ ( $\text{H}_2\text{O}$ )	$\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ (Fe)	$\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ (Pb)	$\frac{\mu_l(\lambda_j)}{\rho}$ (Ar)
1.0000	0.0707	0.0596	0.0685	0.06385
0.5054	0.0963	0.0825	0.1488	0.0864
0.3382	0.1129	0.0995	0.2801	0.1013
0.2541	0.1253	0.1203	0.5919	0.1131
0.2035	0.1352	0.1378	0.9185	0.1223

Tabela II.2 – Coeficientes de atenuação [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV.

$E_j[\text{MeV}]$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{H}_2\text{O})$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{Tecido Mole})$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{Osso})$
1.2500	0.02965	0.02938	0.02745
0.5623	0.03292	0.03262	0.03062
0.3627	0.03256	0.03227	0.03057
0.2677	0.03141	0.03114	0.03022
0.2121	0.03007	0.02981	0.03006

Tabela II.3 – Coeficientes de absorção [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV.

$E_j[\text{MeV}]$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{H}_2\text{O})$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{Tecido Mole})$	$\frac{\mu_a(\lambda_j)}{\rho}(\text{Osso})$
1.2500	0.02965	0.02938	0.02745
0.5623	0.03292	0.03262	0.03062
0.3627	0.03256	0.03227	0.03057
0.2677	0.03141	0.03114	0.03022
0.2121	0.03007	0.02981	0.03006

Tabela II.4 – PODE de Parada de Colisão [ $\text{MeV cm}^2/\text{g}$ ] em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25 MeV.

$E_j[\text{MeV}]$	$(S/\rho)_{col}(\text{H}_2\text{O})$	$(S/\rho)_{col}(\text{Tecido Mole})$	$(S/\rho)_{col}(\text{Osso})$
1.2500	1.829	1.809	1.614
0.5623	1.987	1.968	1.749
0.3627	2.210	2.192	1.952
0.2677	2.459	2.439	2.169
0.2121	2.717	2.695	2.393

Tabela II.5 – Dados dos meios materiais considerados.

Meio	$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	$Z/A$	$Z$	$\alpha$
Água	1.000	0.55508	7.2167	0.2223
Ferro	7.874	0.46556	26.000	1.4631
Chumbo	15.50	0.39575	82.000	1.7988
Tecido Mole (ICRU 44)	1.060	0.54996	7.0200	0.2335
Osso (ICRU 44)	1.920	0.51478	10.866	0.3958