

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Solução da Equação de Transporte
Multidimensional em Geometria Cartesiana e
Meio Infinito Usando Derivada Fracionária**

por

Bárbara Denicol do Amaral

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Marco Túlio de Vilhena,
Orientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2003.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Denicol do Amaral, Bárbara

Solução da Equação de Transporte Multidimensional em Geometria Cartesiana e Meio Infinito Usando Derivada Fracionária / Bárbara Denicol do Amaral.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2003.

90 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2003.

Orientador: Túlio de Vilhena, Marco

Dissertação: Matemática Aplicada
Equação de transporte, Derivada Fracionária

**Solução da Equação de Transporte
Multidimensional em Geometria Cartesiana e
Meio Infinito Usando Derivada Fracionária**

por

Bárbara Denicol do Amaral

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientador: Prof. Dr. Marco Túlio de Vilhena,

Banca examinadora:

Prof. Dr. Carlos Malamut
CDTN/MG

Prof. Dr. Jorge Zabadal
PROMEC/UFRGS

Prof^a. Dra. Cynthia Segatto
PPGMA_p/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
20 de Fevereiro de 2003.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

AGRADECIMENTO

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

Ao meu orientador, Professor Marco Túlio de Vilhena, pela orientação e direção recebidas.

Ao Professor Jorge Zabadal pelos inestimáveis conselhos oferecidos e paciência demonstrada, sempre disposto a auxiliar.

À colega Fabíola Sperotto pela sua amizade e companherismo sempre constantes.

Ao CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pelo financiamento deste trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	IX
LISTA DE TABELAS	X
LISTA DE ABREVIATURAS	XI
RESUMO	XIII
ABSTRACT	XIV
1 INTRODUÇÃO	1
2 O MÉTODO DA DERIVADA FRACIONÁRIA	5
2.1 Introdução	5
2.2 A Equação de Transporte	6
2.3 A Derivada Fracionária	8
2.3.1 Aproximação Integral	11
2.3.2 Aproximação por Variável Complexa	14
2.3.3 A Fórmula de Leibniz para Derivadas Fracionárias	18
2.3.4 Operador Linear	22
2.3.5 Representação de um Operador em Termos de Derivada Fracionária	23
2.3.6 Solução de um Problema Usando a Regra Generalizada do Produto para Íntegro-Diferenciação	27

3	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM UMA DIMENSÃO COM O NÚCLEO DE KLEIN-NISHINA	29
3.1	Introdução	29
3.2	Formulação	29
4	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM DUAS DIMENSÕES CONSIDERANDO ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO	36
4.1	Introdução	36
4.2	Extensão para Problemas em Duas Dimensões	36
4.3	Formulação	37
5	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM TRÊS DIMENSÕES COM O NÚCLEO DE RUTHERFORD	43
5.1	Introdução	43
5.2	Extensão para Problemas em Três Dimensões	43
5.3	Formulação	44
6	RESULTADOS NUMÉRICOS	49
6.1	Cálculo dos Fluxos Angular e Escalar em Uma Dimensão	51
6.2	Cálculo do Fluxos Angular e Escalar em Duas Dimensões	54
6.2.1	Espalhamento Isotrópico em uma Placa Quadrada com 100 cm de Lado	55
6.3	Cálculo dos Fluxos Angular e Escalar em Três Dimensões	57
6.4	Cálculo de Dose Absorvida	59
6.4.1	Introdução à Dosimetria	59

6.4.2	Noções Fundamentais	60
6.4.2.1	Radiação Ionizante	60
6.4.2.2	Dose Absorvida	60
6.4.2.3	Taxa de Dose Absorvida	62
6.4.2.4	Dose Equivalente	62
6.5	Cálculo de Dose	63
7	CONCLUSÃO	68
	BIBLIOGRAFIA	70
	APÊNDICE A DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	
	- FORMA GENÉRICA	75
A.1	Definições e Notações	75
A.1.1	Nêutron como uma Partícula Pontual	75
A.1.2	Densidade Angular de Nêutrons	76
A.1.3	Densidade de Nêutrons	76
A.1.4	Corrente Angular de Nêutrons	76
A.1.5	Fluxo Angular de Nêutrons	77
A.1.6	Fluxo Escalar de Nêutrons	77
A.1.7	Corrente de Nêutrons	77
A.1.8	Fontes Independentes	78
A.1.9	Seções de Choque	78

VIII

A.1.10	Taxas de Interação	80
A.2	Derivação da Equação de Transporte de Nêutrons	80
APÊNDICE B	A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO DEPENDENTE DA ENERGIA	86
APÊNDICE C	TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO E ABSORÇÃO	90

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Corte de ramo ao longo do eixo real do ponto $z = x$ até $-\infty$. . .	14
Figura 2.2	L_1 , círculo γ e L_2	16
Figura 6.1	Espalhamento isotrópico em uma placa 100 x 100 cm.	55
Figura 6.2	Simulação do fluxo angular como uma função da posição em $z=1$	57

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Fluxo escalar (fótons/cm ² s) em uma camada de água de 20 cm de espessura e fótons com energia inicial de 2 Mev.	53
Tabela 6.2	Fluxo escalar (fótons/cm ² s) em uma camada de água de 100 cm de espessura e fótons com energia inicial de 1,25 Mev.	54
Tabela 6.3	Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,99 \text{ cm}^{-1}$.	56
Tabela 6.4	Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$.	56
Tabela 6.5	Fluxo Escalar.	58
Tabela 6.6	Taxa de Dose Absorvida para uma camada de água de 20 cm de espessura.	65
Tabela 6.7	Taxa de Dose Absorvida para uma camada de água de 100 cm de espessura.	65
Tabela C.1	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1,25 Mev.	90
Tabela C.2	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 2 Mev.	90
Tabela C.3	Dados do meio material considerado.	90

LISTA DE ABREVIATURAS

A	Massa atômica
\mathcal{A}, \mathcal{B}	Operadores lineares
$c(\lambda)$	Coefficiente de atenuação linear
D	Dose absorvida
D_T	Taxa de dose absorvida considerando multigrupo de energia
$D_T(x)$	Taxa de dose absorvida considerando dependência contínua do fluxo angular com a energia
dE	Elemento infinitesimal de energia
dV	Elemento infinitesimal de volume
E_0	Energia incidente no meio
f_m	Fluxo angular incidente na fronteira $x=0$
g_m	Fluxo angular incidente na fronteira $x=L$
H	Função de Heaviside
H_{eq}	Dose equivalente
$j(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$	Corrente angular de nêutrons
J	Corrente parcial de nêutrons
$J(\underline{r}, E, t)$	Corrente de nêutrons
$K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu \rightarrow \mu')$	Seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina
$k(r, r', \Omega, \Omega')$	Núcleo da equação de transporte
q	Ordem da derivada fracionária
$Q(x, y)$	Termo de fonte
QF	Fator de qualidade
N_A	Constante de Avogadro
$n(\underline{r}, E, t)$	Densidade de nêutrons
$N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$	Densidade angular de nêutrons
\underline{r}	Vetor posição
\underline{v}	Vetor velocidade

XII

Z	Número atômico
δ	Função generalizada Delta de Dirac
λ	Comprimento de onda da partícula espalhada
λ'	Comprimento de onda da partícula incidente
μ	Direção da partícula espalhada
μ'	Direção da partícula incidente
μ_a	Coefficiente de absorção do meio material
$\psi(x, y, \mu, \eta)$	Fluxo angular de partículas em x e y nas direções μ e η
$\psi(x, \lambda, \mu)$	Fluxo angular de partículas em x na direção μ para o comprimento de onda λ
$\psi(x, \lambda)$	Fluxo escalar de partículas em x para o comprimento de onda λ
$\psi(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$	Fluxo angular de nêutrons
$\phi(\underline{r}, E, t)$	Fluxo escalar de nêutrons
ρ	Densidade do meio material
$\sigma(e)$	Seção de choque de espalhamento elástico
$\sigma(f)$	Seção de choque de fissão
$\sigma(i)$	Seção de choque de espalhamento inelástico
$\sigma(s)$	Seção de choque de espalhamento
$\sigma(t)$	Seção de choque macroscópica total
$\sigma(T)$	Seção de choque de Thomson
$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu \rightarrow \mu')$	Núcleo de espalhamento

RESUMO

Neste trabalho, foi construída uma forma integral para a solução das equações de transporte em uma, duas e três dimensões, considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, espalhamento isotrópico e o núcleo de espalhamento de Rutherford, respectivamente, seguindo a mesma idéia proposta em trabalhos recentes, nos quais foi construída uma solução para a equação de transporte de nêutrons em geometria cartesiana, usando derivada fracionária. A metodologia consiste em igualar a derivada fracionária do fluxo angular à equação integral, determinar a ordem da derivada fracionária comparando o núcleo da equação integral com o da definição de Riemann-Liouville. Essa formulação foi aplicada ao cálculo de dose absorvida. São apresentadas soluções geradas a partir do emprego do método da derivada fracionária e comparadas a resultados disponíveis na literatura.

ABSTRACT

In this work, an integral form for the one, two and three-dimensional transport equation solutions were constructed, with the Klein-Nishina scattering kernel, isotropic scattering and Rutherford scattering kernel, following the same idea proposed in recent works, in which a solution for the multidimensional neutron transport equation in a cartesian geometry, using fractional derivative, was constructed. The methodology consists in equalize the fractional derivative of the angular flux to the integral equation, determine the order of the fractional derivative comparing the kernel of the integral equation with the one of Riemann-Liouville definition of fractional derivative. This formulation is applied on the calculation of the absorbed dosis. The solutions obtained through the application of the fractional derivative method were presented and compared with numeric results available in the literature.

1 INTRODUÇÃO

Há mais de cem anos, quando o século XIX aproximava-se do seu final, os cientistas do mundo todo estavam convictos de terem chegado a uma descrição precisa do mundo físico. Como afirmou o físico Alastair Rae, “Ao final do século XIX pareciam já ser conhecidos os princípios fundamentais básicos que governavam o comportamento do universo físico” [1]. De fato, vários cientistas diziam que o estudo da física estava completo: não restavam grandes descobertas a serem feitas, apenas detalhes e toques finais.

Mas no fim da última década, veio a primeira das descobertas que abalaram esta declaração. Roentgen, no final de 1895, descobriu raios que atravessavam os músculos, como não havia explicação para eles, resolveu chamá-los de raios X. Dois meses depois, já no ano de 1896, Henri Becquerel descobriu que um pedaço de minério de Urânio emitia algo que nublava as chapas fotográficas, na verdade, eram raios gamas emitidos pelo Urânio que exibia o fenômeno da radioatividade. Em 1897, Thomson identificou o elétron como a partícula carregada responsável pela eletricidade (Modelo atômico “Pudim de ameixa”). No ano seguinte, o casal Curie anunciou a descoberta do elemento Rádio. No início do século XX, Planck introduziu o conceito da Teoria Quântica da Energia; Rutherford identificou as emanções do Rádio e denominou-as de radiações alfa, beta e gama e introduziu a Teoria da Transmutação Nuclear. Em 1905, Einstein concluiu que a massa de qualquer corpo cresce com sua velocidade, e estabeleceu sua conhecida fórmula $E = m.c^2$, que expressa a equivalência de massa e energia. Em 1932, James Chadwick mostrou que o que Bothe e Becker pensavam ser raios gamas, provenientes do bombardeio do Berílio com partículas alfa do Polônio, na verdade, eram nêutrons. Juntamente com todas essas descobertas no meio científico surge, o que podemos chamar, de tecnologia nuclear, que devido as suas inúmeras aplicações beneficiou e, continua beneficiando, áreas como as da farmácia, da agricultura, da medicina e da indústria, pois, a cada dia, novas técnicas nucleares são desenvolvidas nos diversos campos de atividade humana, possibilitando a execução de tarefas impossíveis de serem realizadas pelos

meios convencionais.

O meio ambiente está exposto a uma certa quantidade de radiação natural na forma de partículas e raios. Além da luz solar, sem a qual a vida não seria possível, todos os seres vivos recebem radiação cósmica do espaço e radiação natural de materiais presentes na Terra. A quantidade dessas radiações variam de um local para o outro, pois dependem do conteúdo mineral presente no solo e da elevação do nível do mar. O homem e outras espécies têm sobrevivido e evoluído neste ambiente, apesar do fato de a radiação poder ter um efeito danoso ao tecido biológico. O emprego de materiais radioativos, aceleradores e outras fontes emissores de radiação, geraram uma infinidade de problemas relacionados com proteção radiológica, já que esses meios são capazes de produzir radiação de alta energia. No projeto de uma sala de radiodiagnóstico ou de um reator nuclear, deve-se ter conhecimento da distribuição do fluxo de radiação em diversos pontos de interesse, assim como, das espessuras e materiais de blindagens, potência do reator, doses equivalente e absorvida, entre outras. Juntamente com os valores de dose obtidos experimentalmente, deve-se, ainda, conhecer a teoria envolvida no processo de interação da radiação com a matéria, a fim de que os projetos possam ser otimizados.

Nos últimos anos, vários métodos foram propostos para resolver, em forma analítica, aproximações da equação de transporte unidimensional [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16] e multidimensional [17]. Dentre os métodos para a solução da equação unidimensional, podemos citar o método P_N , que faz uso da expansão em harmônicos esféricos ou ainda, o método das ordenadas discretas (S_N), onde a equação de transporte é calculada sobre um conjunto de direções discretas, sendo associado um peso para cada uma dessas direções. Um conjunto de equações algébricas é obtido, e estas podem ser resolvidas por procedimentos de recorrência e iterações, ou uma solução analítica pode ser obtida mediante o uso do método LTS_N [2, 18, 19, 20]. A formulação LTS_N baseia-se na aplicação da transformada de Laplace à variável espacial da equação, resultando num sistema linear algébrico para o fluxo transformado, que após é invertido analiticamente através da expansão de Heaviside. Cumpre ressaltar que a técnica utilizada na solução das aproximações

da equação de transporte foi a Transformada de Laplace. É importante ainda observar que a metodologia utilizada em problemas unidimensionais, como a LTS_N , é aplicável na solução de problemas multidimensionais de transporte somente para a aproximação nodal [21, 22].

Recentemente Zabadal, Vilhena, Segato e Pazos [23, 24] propuseram um método de solução da equação de transporte multidimensional em geometria cartesiana, baseado na técnica da derivada fracionária. A idéia básica desse método consiste em reescrever a equação de transporte na forma integral, comparar o núcleo da respectiva solução formal com o da definição de Riemann-Liouville, e resolver a equação algébrica correspondente para encontrar a ordem íntegro-diferencial. Esta metodologia foi aplicada na solução de problemas de transporte de nêutrons em duas e três dimensões considerando espalhamento isotrópico.

Seguindo esta idéia, neste trabalho, é construída uma forma integral para a solução da equação de transporte multidimensional em geometria cartesiana e meio infinito. Cumpre observar, que esta metodologia é aplicada na solução de problemas de transporte de fótons em uma dimensão, transporte de nêutrons em duas dimensões e, de elétrons em três dimensões. Para o caso unidimensional, consideramos a equação de transporte dependente da energia, tendo como a seção de choque de espalhamento o núcleo de Klein-Nishina. Já, para o caso bidimensional, trabalhamos com a equação de transporte em geometria plana com espalhamento isotrópico num meio homogêneo e com fonte externa. Finalmente, para o caso tridimensional, a equação considerada é a equação de transporte em geometria cartesiana, que tem como seção de choque de espalhamento diferencial o núcleo de Rutherford [25]. Abordagens anteriores, considerando-se meio finito, foram propostas somente para as duas primeiras equações. Para o caso unidimensional, por Wood [26], Trindade [37], Sauer [38] e Lunelli [39]. Wood e Trindade utilizaram as equações P_N . No primeiro, as mesmas foram resolvidas pelo método dos momentos e, no segundo, através da transformada de Laplace. Já Sauer e Lunelli, usaram o método LTS_N , que fornece uma solução analítica para o problema de ordenadas discretas. Para o caso bidimensional, Gehlen [40] propôs uma solução para a equação

de transporte utilizando o método LTS_N -Dependência Angular Contínua (DAC).

Aqui, além de estudarmos as características específicas do método da derivada fracionária, associadas a esses três tipos de problemas, nosso objetivo também é a aplicação da formulação proposta para o cálculo da taxa de dose absorvida, já que a determinação dessa quantidade é de grande importância no campo de radiação aplicado à medicina, em especial, na área de radioterapia, pois é a partir dela que um planejamento radioterápico adequado, a cada paciente, poderá ser feito.

Para atingir esse objetivo, o trabalho está organizado do seguinte modo: no capítulo 2 descrevemos o método da derivada fracionária, o qual aplicamos, nos capítulos 3, 4 e 5 respectivamente, à equação de transporte em uma dimensão considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e a dependência contínua do fluxo angular com a energia, à equação de transporte em duas dimensões para encontrarmos o valor do fluxo angular numa placa plana considerando espalhamento isotrópico e, por fim, à equação de transporte em três dimensões considerando como seção de choque de espalhamento diferencial o núcleo de Rutherford. No capítulo 6, é apresentado o cálculo da taxa de dose absorvida em uma região irradiada em uma dimensão. Ainda no capítulo 6, são apresentados os resultados numéricos obtidos através da aplicação do método da derivada fracionária a problemas implementados. Finalmente, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões e discussões pertinentes a esse trabalho.

2 O MÉTODO DA DERIVADA FRACIONÁRIA

2.1 Introdução

O conceito de operador diferencial $D = \frac{\partial}{\partial x}$ é familiar a todos os que estudam cálculo elementar. E para certas funções f , a n -ésima derivada de f , a saber $D^n f(x) = \frac{\partial^n}{\partial x^n}$, é bem definida - desde que n seja um inteiro positivo. Em 1695, L'Hôpital indagou Leibniz sobre qual significado poderia ser atribuído a $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$ se n fosse um número não inteiro. Desde esta época, o cálculo fracionário tem atraído a atenção de diversos matemáticos famosos como Euler, Laplace, Fourier, Abel, Liouville, Riemann e Laurent. Mas foi somente após 1884, que a teoria de operadores generalizados alcançou um nível em seu desenvolvimento tornando-se um ponto de partida para a matemática moderna. Desde então, a teoria vem sendo estendida para incluir operadores $\frac{\partial^q}{\partial x^q}$, onde q pode ser racional ou irracional, positivo ou negativo, real ou complexo. Assim, o nome cálculo fracionário tornou-se não muito apropriado, uma melhor descrição seria Derivadas e Integrais para uma Ordem Arbitrária.

Neste trabalho, consideramos apenas um caso particular das chamadas Derivadas de Ordem Arbitrária, operadores da forma $\frac{\partial^q}{\partial x^q}$, onde q é um número não inteiro, sendo assim não usamos nenhuma das nomenclaturas citadas anteriormente, e sim, Derivada Fracionária.

Este capítulo é dedicado à apresentação e formulação do Método da Derivada Fracionária, bem como, à descrição de argumentos matemáticos necessários para o estudo desse método, que consiste, basicamente, em igualar a derivada fracionária do fluxo angular à equação integral e determinar a ordem da derivada fracionária comparando o núcleo da equação integral com o da definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville. Inicialmente, tratamos do estudo de problemas para o caso unidimensional da equação de transporte. Mais adiante, esta formulação

é estendida para problemas para o caso multidimensional.

A seguir, descrevemos os passos básicos que caracterizam a formulação desse método. Mas, primeiramente, falamos um pouco a respeito das equações trabalhadas.

2.2 A Equação de Transporte

A equação de transporte de partículas neutras pode ser obtida através de um balanço de partículas, para adições e subtrações de radiação, em um elemento de volume de espaço de fase, energia e direção apropriados. No apêndice A, deste trabalho, apresentamos a derivação da equação de transporte de partículas neutras. Esta equação, em sua forma básica, pode ser escrita como,

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{\Omega} \nabla \psi + \sigma_t \psi = \int \int \sigma'_t f' \psi' d\underline{\Omega}' dE' + Q. \quad (2.1)$$

Na verdade, a equação de transporte de partículas é obtida considerando as taxas nas quais partículas de diferentes energias, movendo-se em diferentes direções, entram e saem de um pequeno elemento de volume. O produto $\sigma'_t f'$ é a medida da taxa (por unidade de fluxo angular) na qual, partículas de energia E' na direção $\underline{\Omega}'$ tornam-se partículas de energia E na direção $\underline{\Omega}$ como resultado de todas as interações.

Neste trabalho, tratamos de problemas estacionários unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais, em geometria cartesiana. Trabalhamos na obtenção da solução da equação de transporte, considerando três tipos de problemas, basicamente. O primeiro problema considerado é dado pela equação,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \psi(x, \lambda, \mu) = \int_{-1}^1 \int_0^\lambda \widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) \psi(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\mu'. \quad (2.2)$$

Nesta equação estamos considerando o fluxo angular dependendo de forma contínua com a energia. Ela está escrita em termos do comprimento de onda do fóton, λ , sem fonte externa. Aqui, $c(\lambda)$ representa o coeficiente de atenuação e o núcleo de espalhamento é escrito como,

$$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) = \frac{\lambda}{\lambda'} K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu), \quad (2.3)$$

onde $K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu)$ representa a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina para o espalhamento Compton [26] e é dado pela seguinte expressão,

$$K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left(\frac{\lambda'}{\lambda}\right)^2 \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu'). \quad (2.4)$$

No problema bidimensional, consideramos a seguinte equação,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, y, \mu, \eta)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, \mu, \eta)}{\partial y} + \sigma_t \psi(x, y, \mu, \eta) = \sigma_s \int_{-1}^1 \int_0^1 \psi(x, y, \mu', \eta') d\eta' d\mu' + Q(x, y), \quad (2.5)$$

em um meio homogêneo, espalhamento isotrópico, um grupo de energia e fonte externa. No terceiro problema estudado temos,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial x} + \\ & + \sqrt{1 - \mu^2} \left(\cos(\varphi) \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial y} + \sin(\varphi) \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial z} \right) + \sigma_t \psi(x, y, z, \mu, \varphi) = \\ & = \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{a}{(b - \mu)^2} \psi(x, y, z, \mu', \varphi') d\varphi' d\mu', \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde a seção de choque de espalhamento diferencial considerada é a de Rutherford [36].

Nos capítulos seguintes descrevemos, com detalhes, soluções das equações acima mencionadas pela técnica de derivada fracionária.

2.3 A Derivada Fracionária

A técnica da derivada fracionária tem sido amplamente empregada para resolver equações diferenciais lineares e integrais, como em problemas de difusão em coordenadas curvilíneas [27, 30, 31, 32]. A primeira referência de uma derivada de ordem arbitrária apareceu, em 1819, no texto de S. F. Lacroix [33]. Ele desenvolveu matematicamente a generalização de derivada para o caso de ordens inteiras: tomando $y = x^m$, m um inteiro positivo, temos,

$$x^m \rightarrow mx^{m-1} \rightarrow m(m-1)x^{m-2} \rightarrow \dots \quad (2.7)$$

Lacroix, por indução, facilmente chegou a n -ésima derivada,

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}, m \geq n. \quad (2.8)$$

Como estamos tratando de derivadas de ordens arbitrárias, faz-se necessário o uso da função Gama e de suas propriedades, que desempenha um importante papel na teoria de íntegro-diferenciação. Assim a Eq.(2.8) pode ser expressa como,

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-n+1)} x^{m-n}. \quad (2.9)$$

Fazendo $n = \frac{1}{2}$, $m = 1$, $y = x$, temos,

$$\frac{d^{\frac{1}{2}} y}{dx^{\frac{1}{2}}} = \frac{\Gamma(2)}{\Gamma(\frac{3}{2})} x^{\frac{1}{2}} = \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} = \frac{2\sqrt{x}}{\sqrt{\pi}}. \quad (2.10)$$

Após os resultados obtidos por Lacroix, outras contribuições foram feitas, nesta área, por Leibniz, Euler, Laplace e Fourier, mas o primeiro a fazer uso de operadores fracionários foi Niels Henrik Abel [34], em 1823. Em 1869, o trabalho de N. Ya. Sonin [35], “On the differentiation with arbitrary index”, introduziu o que hoje é chamada de definição de Riemann-Liouville. Seu ponto inicial foi

a fórmula integral de Cauchy. A n -ésima derivada da fórmula integral de Cauchy é dada por,

$$D^n f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta. \quad (2.11)$$

Não há problemas em generalizar $n!$ para valores arbitrários, já que $q! = \Gamma(q + 1)$. Entretanto, quando n não é um inteiro, o integrando da equação acima não mais contém um pólo, mas um ponto de ramificação (*branch point*). Um contorno apropriado seria então necessário para cortar o ramo que não estava incluído no trabalho de Sonin.

Em 1884, H. Laurent publicou em seu trabalho que a teoria de operadores generalizados alcançava um nível em seu desenvolvimento apropriado para ser um ponto de partida para a matemática atual. A teoria de cálculo fracionário está intimamente ligada com a teoria de operadores. O operador D ou $\frac{\partial}{\partial x}$ e D^2 ou $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ indica uma regra de transformação de uma função em outra função que são as derivadas de primeira e segunda ordens. A regra de transformação é familiar para todos que estudam cálculo. Laurent partiu, também, da fórmula de Cauchy. Seu contorno foi um circuito aberto sobre uma superfície de Riemann, em contraste com o circuito de Sonin. O método da integral de contorno produziu a definição,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_c^x (x - t)^{-q-1} f(t) dt, \quad \text{Re}(q) < 0, \quad (2.12)$$

para derivadas de ordens arbitrárias.

Quando $x > c$ na Eq.(2.12), temos o que podemos chamar de versão de Riemann. Para $c = -\infty$, temos,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_{-\infty}^x (x - t)^{-q-1} f(t) dt, \quad \text{Re}(q) < 0, \quad (2.13)$$

que é chamada de versão de Liouville. E finalmente, para $c = 0$,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt, \quad \text{Re}(q) < 0, \quad (2.14)$$

temos a versão de Riemann-Liouville, que é a mais usada.

O estudo da derivada de ordem arbitrária, desde então, vem sendo aprimorado e aplicado em diversas áreas da ciência e engenharia, incluindo dinâmica de fluidos, teoria eletromagnética, redes elétricas, entre outras. Essa teoria não faz parte do que podemos chamar de matemática moderna, possivelmente porque ainda há muito a ser descoberto nesta área, pois muitos estudiosos ainda não estão familiarizados com ela.

Neste trabalho, aplicamos a técnica da derivada fracionária, nova na área de transporte, para determinarmos uma solução para a equação de transporte em uma, duas e três dimensões. A derivada fracionária é empregada a fim de obtermos uma nova regra para a aplicação de operadores exponenciais com a finalidade de chegarmos a uma solução formal para a equação de transporte, evitando com isso, o cálculo explícito da potência de operadores e métodos iterativos. Para conseguirmos esta nova regra, temos que obter uma expressão analítica para a ordem da derivada fracionária como uma função das variáveis espacial e angular, onde seguimos os seguintes procedimentos:

- (1) Reescrever a equação de transporte na forma integral;
- (2) Comparar o núcleo do respectivo operador integral com o da definição de Riemann-Liouville para operador de derivada fracionária, e resolver a equação algébrica correspondente para encontrar a ordem íntegro-diferencial.

Para a melhor compreensão do método da Derivada Fracionária são necessários alguns argumentos matemáticos, que são apresentados e discutidos nas subseções seguintes. Posteriormente, descrevemos o processo para a obtenção da ordem da derivada fracionária correspondente a um operador de evolução arbitrário empregando a definição de Riemann-Liouville para o operador de derivada fracionária; usamos a expressão obtida para o cálculo da solução de um problema de evolução usando a regra generalizada do produto de funções de derivada fracionária;

obtemos uma forma integral para a equação de transporte pela aproximação da função Delta de Dirac e sua derivada de primeira ordem para funções contínuas; e então, apresentamos a solução formal para o fluxo angular comparando os núcleos acima mencionados.

2.3.1 Aproximação Integral

Podemos associar a simbologia,

$$\frac{\partial^{-1}f}{\partial x^{-1}}, \quad (2.15)$$

como uma integral indefinida de f com respeito a x . Estipulando um limite inferior c , podemos definir,

$$\frac{\partial^{-1}f}{\partial x^{-1}} = \int_c^x f(t)dt, \quad (2.16)$$

onde x é uma variável muda, assim a extensão natural de (2.16) conduz a seguinte definição,

$$\frac{\partial^{-2}f(x)}{\partial x^{-2}} = \int_c^x dx_1 \int_c^{x_1} f(t)dt, \quad (2.17)$$

⋮

$$\frac{\partial^{-n}f(x)}{\partial x^{-n}} = \int_c^x dx_1 \int_c^{x_1} dx_2 \int_c^{x_2} dx_3 \dots \int_c^{x_{n-1}} f(t)dt, \quad (2.18)$$

onde x_1, x_2, \dots, x_{n-1} são variáveis mudas de integração.

O primeiro argumento que leva à definição de derivada fracionária começa com a consideração da n -ésima integral dada por (2.18).

A função f na equação (2.18) será assumida contínua no intervalo $[c, b]$, onde $x < b$. Afirmamos que a equação (2.18) pode ser reduzida a uma integral simples da forma,

$$\int_c^x K_n(x, t)f(t)dt, \quad (2.19)$$

onde o núcleo $K_n(x, t)$ é uma função de n , x e t . Mostraremos que $K_n(x, t)$ é uma função bem definida mesmo quando n não é um inteiro positivo. Assim, podemos definir $\frac{\partial^{-q}f(x)}{\partial x^{-q}}$ como,

$$\frac{\partial^{-q}f(x)}{\partial x^{-q}} = \int_c^x K_q(x, t)f(t)dt, \quad (2.20)$$

para todo q com $Re(q) > 0$.

Para provar essa hipótese, começamos dizendo que se $G(x, t)$ é seccionalmente contínua em $[c, b] \times [c, b]$, onde $x < b$, então da teoria de funções temos,

$$\int_c^x dx_1 \int_c^{x_1} G(x_1, t)dt = \int_c^x dt \int_t^x G(x_1, t)dx_1. \quad (2.21)$$

Se, em particular,

$$G(x_1, t) \equiv f(t), \quad (2.22)$$

isto é, se $G(x_1, t)$ é uma função somente da variável t , então a Eq.(2.21) pode ser escrita como,

$$\int_c^x dx_1 \int_c^{x_1} f(t)dt = \int_c^x f(t)dt \int_t^x dx_1 = \int_c^x (x - t)f(t)dt. \quad (2.23)$$

Assim, reduzimos a integral iterada (2.23) para uma integral simples.

Se $n = 3$, então a equação (2.18) torna-se,

$$\frac{\partial^{-3}f(x)}{\partial x^{-3}} = \int_c^x dx_1 \int_c^{x_1} dx_2 \int_c^{x_2} f(t)dt = \int_c^x dx_1 \left[\int_c^{x_1} dx_2 \int_c^{x_2} f(t)dt \right]. \quad (2.24)$$

Se aplicarmos a identidade (2.23) ao par de integrais dentro dos colchetes, temos,

$$\frac{\partial^{-3}f(x)}{\partial x^{-3}} = \int_c^x dx_1 \left[\int_c^{x_1} f(t)dt \int_t^x dx_2 \right] = \int_c^x dx_1 \left[\int_c^{x_1} (x_1 - t)f(t)dt \right]. \quad (2.25)$$

Outra aplicação de (2.23) à fórmula acima resulta,

$$\frac{\partial^{-3}f(x)}{\partial x^{-3}} = \int_c^x f(t)dt \int_t^x (x_1 - t)dx_1 = \int_c^x f(t) \frac{(x - t)^2}{2} dt. \quad (2.26)$$

Repetindo o processo n -vezes reduzimos (2.18) à (2.19), onde,

$$K_n(x, t) = \frac{(x - t)^{n-1}}{(n - 1)!}. \quad (2.27)$$

Conseqüentemente podemos escrever $\frac{\partial^{-n}f(x)}{\partial x^{-n}}$ como,

$$\frac{\partial^{-n}f(x)}{\partial x^{-n}} = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_c^x (x - t)^{n-1} f(t)dt. \quad (2.28)$$

Claramente, o lado direito da expressão (2.28) vale para qualquer número n cuja parte real é maior que zero. Chamamos,

$$\frac{1}{\Gamma(q)} \int_c^x (x - t)^{q-1} f(t)dt, \quad Re(q) > 0, \quad (2.29)$$

de derivada fracionária de f de ordem q e a denotamos por $\frac{\partial^{-q}f(x)}{\partial x^{-q}}$.

Neste momento, cumpre observar que a equação (2.29) pode também ser escrita da seguinte forma,

$$\frac{1}{\Gamma(-q)} \int_c^x (x - t)^{-q-1} f(t)dt, \quad Re(q) < 0. \quad (2.30)$$

Neste trabalho, escolhemos trabalhar com a equação (2.30).

2.3.2 Aproximação por Variável Complexa

O segundo argumento matemático segue da fórmula da integral de Cauchy que diz que se $f(z)$ é univaluada e analítica em uma região aberta de \mathbf{A} do plano complexo, e se A é uma região aberta no interior de \mathbf{A} limitada por uma curva fechada C , então,

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta)d\zeta}{(\zeta - z)}, \quad (2.31)$$

para qualquer ponto z em A . Da equação (2.31) segue que,

$$D^n f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int_C \frac{f(\zeta)d\zeta}{(\zeta - z)^{n+1}}. \quad (2.32)$$

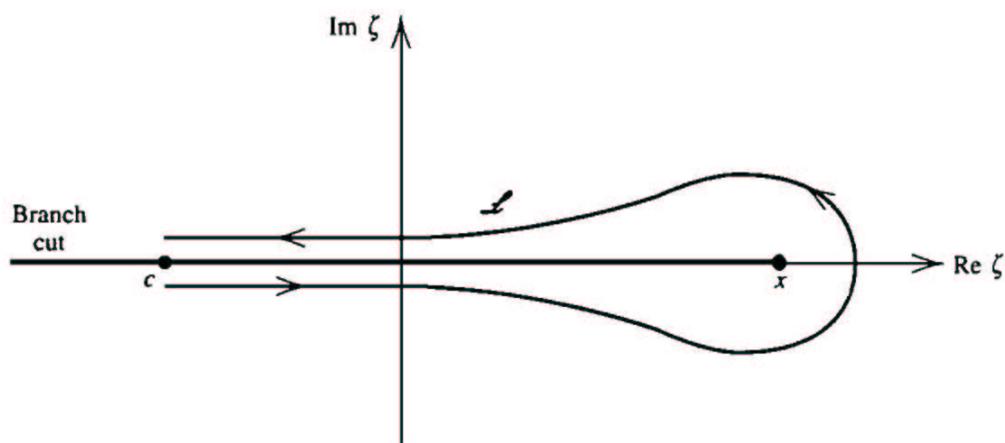


Figura 2.1: Corte de ramo ao longo do eixo real do ponto $z = x$ até $-\infty$.

Se n é um número arbitrário, digamos q , podemos substituir $n!$ por $\Gamma(q + 1)$ na equação anterior. Mas se q não é um número inteiro, o ponto z será um ponto de ramificação (*branch point*) e não mais um pólo do integrando de (2.32). Uma

simples curva fechada C não será mais um contorno apropriado. Para superar esta dificuldade é feito um corte de ramo (*branch cut*) ao longo do eixo real do ponto z para o lado do eixo negativo infinito. Assumimos que z é um número real positivo, por exemplo x (veja figura(2.1)), e definimos $\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q}$ como,

$$\frac{\Gamma(q+1)}{2\pi i} \int_c^{x^+} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta = \frac{\Gamma(q+1)}{2\pi i} \int_{\mathcal{L}} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta. \quad (2.33)$$

O caminho \mathcal{L} é então a união de L_2 , γ , L_1 , onde γ é um círculo de raio r com centro em x , e L_1 e L_2 segmentos de linha $[c, x-r]$. Estes segmentos de linha aproximam-se da parte do eixo real no plano ζ sobre diferentes pedaços.

Se $\zeta - x$ é um número positivo, definimos $\ln(\zeta - x)$ como um número real, assim sobre o círculo γ (veja figura(2.2)), usando as propriedades de números complexos [28], temos,

$$(\zeta - x)^{-q-1} = e^{(-q-1)[\ln|\zeta-x|+i\Theta]}. \quad (2.34)$$

Já que $\Theta = \pi$ sobre L_1 ,

$$(\zeta - x)^{-q-1} = e^{(-q-1)[\ln|\zeta-x|+i\pi]} = e^{(-q-1)[\ln(x-\zeta)+i\pi]}, \quad (2.35)$$

e dado que $\Theta = -\pi$ sobre L_2 ,

$$(\zeta - x)^{-q-1} = e^{(-q-1)[\ln(x-\zeta)-i\pi]}. \quad (2.36)$$

Retornando a equação (2.33), se $Re(q) < 0$,

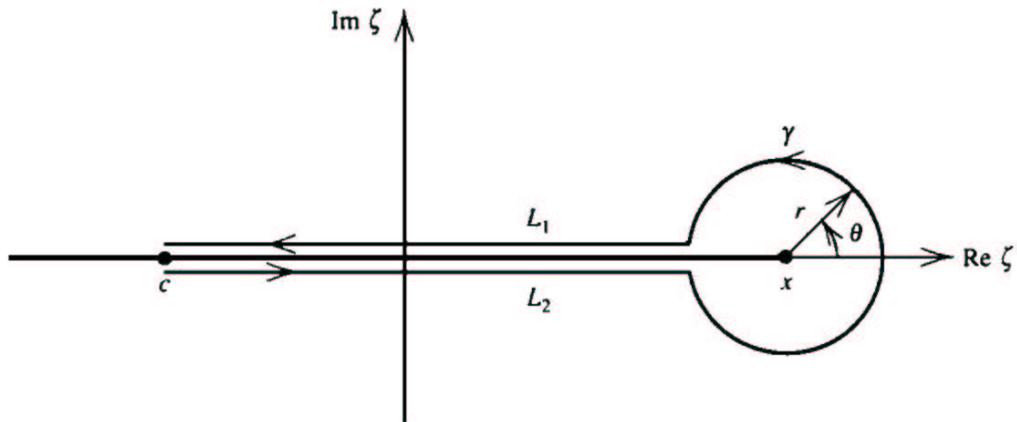


Figura 2.2: L_1 , círculo γ e L_2 .

$$\begin{aligned}
 \int_c^{x^+} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta &= \int_{L_2} + \int_{\gamma} + \int_{L_1} = \\
 &= e^{i(q+1)\pi} \int_c^{x-r} (x-t)^{-q-1} f(t) dt + \\
 &\quad + \int_{\gamma} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta + \\
 &\quad + e^{-i(q+1)\pi} \int_{x-r}^c (x-t)^{-q-1} f(t) dt,
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

onde $t = \text{Re}(\zeta)$. Mas,

$$\int_{\gamma} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta = \int_{-\pi}^{\pi} r^{-q-1} e^{-i(q+1)\Theta} f(x + re^{i\Theta}) (ire^{i\Theta}) d\Theta \tag{2.38}$$

e,

$$\left| \int_{\gamma} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta \right| \leq r^{-\text{Re}(q)} \int_{-\pi}^{\pi} |f(x + re^{i\Theta})| d\Theta. \tag{2.39}$$

Conseqüentemente, quando $r \rightarrow 0$, a integral (2.39) aproxima-se de zero. E assim, temos,

$$\int_c^{x^+} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta = [e^{i(q+1)\pi} - e^{-i(q+1)\pi}] \int_c^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt \quad (2.40)$$

ou,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} &= \frac{\Gamma(q+1)}{2\pi i} \int_c^{x^+} (\zeta - x)^{-q-1} f(\zeta) d\zeta = \\ &= \frac{\Gamma(q+1) \sin(q+1)\pi}{\pi} \int_c^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt. \end{aligned} \quad (2.41)$$

A fórmula de reflexão dada por $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}$, implica que,

$$\frac{\Gamma(q+1) \sin(q+1)\pi}{\pi} = \frac{1}{\Gamma(-q)}. \quad (2.42)$$

Conseqüentemente,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_c^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt \quad \text{Re}(q) < 0. \quad (2.43)$$

Se $c > 0$, temos a versão de Riemann, que é dada por,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_c^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt, \quad (2.44)$$

se $c = 0$, temos a versão de Riemann-Liouville para derivadas fracionárias,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt \quad (2.45)$$

e se $c = -\infty$, temos a versão de Liouville,

$$\frac{\partial^q f(x)}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_{-\infty}^x (x-t)^{-q-1} f(t) dt. \quad (2.46)$$

2.3.3 A Fórmula de Leibniz para Derivadas Fracionárias

A fórmula de Leibniz expressa o resultado de um operando sobre o produto de duas funções como uma soma de produtos de operações efetuado sobre cada função. A regra ou fórmula clássica de Leibniz do cálculo elementar é dada por,

$$\frac{\partial^n [f(t)g(t)]}{\partial t^n} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left[\frac{\partial^k g(t)}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{n-k} f(t)}{\partial t^{n-k}} \right], \quad (2.47)$$

onde f e g serão n -vezes diferenciáveis sobre algum intervalo.

Pode-se estender (2.47) para operadores fracionários. Suponha que f é da classe \mathbf{C} , isto é, f é contínua sobre um intervalo aberto e integrável sobre qualquer subintervalo semi-aberto. Se $g(t) = t^p$ onde p é um inteiro positivo, então a integral fracionária do produto fg de ordem $q > 0$ pode ser escrita como,

$$\frac{\partial^{-q} [f(t)g(t)]}{\partial t^{-q}} = \sum_{k=0}^p \binom{-q}{k} \left[\frac{\partial^k g(t)}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-q-k} f(t)}{\partial t^{-q-k}} \right]. \quad (2.48)$$

A semelhança desta fórmula com a (2.47) é óbvia. O problema imediato em que estamos interessados é a extensão de (2.48) para o caso em que g não é um simples polinômio como acima. Assim, suponhamos que f é contínua sobre $[0, X]$ e que g é analítica em a para todo $a \in [0, X]$. Então fg é certamente de classe \mathbf{C} , e para $q > 0$, a derivada fracionária,

$$\frac{\partial^{-q} [f(t)g(t)]}{\partial t^{-q}} = \frac{1}{\Gamma(q)} \int_0^t (t-\xi)^{q-1} [f(\xi)g(\xi)] d\xi, \quad 0 < t \leq X, \quad (2.49)$$

existe. Podemos escrever,

$$\begin{aligned}
g(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\partial^k g(t)}{k!} (t - \xi)^k = \\
&= g(t) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{\partial^k g(t)}{k!} (t - \xi)^k.
\end{aligned} \tag{2.50}$$

A série (2.50) converge para todo ξ em qualquer intervalo que contenha $[0, t]$, e conseqüentemente, uniformemente sobre $(0, t)$. Agora substituindo (2.50) em (2.49) obtemos,

$$\frac{\partial^{-q}[f(t)g(t)]}{\partial t^{-q}} = g(t) \frac{\partial^{-q} f(t)}{\partial t^{-q}} + \frac{1}{\Gamma(q)} \int_0^t (t - \xi)^q f(\xi) \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{\partial^k g(t)}{k!} (t - \xi)^{k-1} d\xi. \tag{2.51}$$

Dado que f é contínua sobre $[0, X]$ e $q > 0$,

$$(t - \xi)^q f(\xi)$$

é limitado sobre $[0, t]$. Conseqüentemente, reescrevendo a equação num único somatório, obtemos,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^{-q}[f(t)g(t)]}{\partial t^{-q}} &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(q+k)}{k! \Gamma(q)} \left[\frac{\partial^k g(t)}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-q-k} f(t)}{\partial t^{-q-k}} \right] = \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{-q}{k} \left[\frac{\partial^k g(t)}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-q-k} f(t)}{\partial t^{-q-k}} \right].
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Sendo assim, obtemos uma equação da mesma forma de (2.47), válida para operadores fracionários.

Aplicando $g(t) = t^p$ em (2.52), temos o seguinte resultado,

$$\frac{\partial^{-q}[f(t)t^p]}{\partial t^{-q}} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{-q}{k} \left[\frac{\partial^k t^p}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-q-k} f(t)}{\partial t^{-q-k}} \right], \quad q > 0, \tag{2.53}$$

onde p é um número inteiro positivo e f de classe \mathbf{C} .

Agora, mostraremos um resultado análogo de operadores fracionários usando a definição proposta por [30], isto é, sobre que condições a fórmula,

$$\frac{\partial^\mu [f(t)g(t)]}{\partial t^\mu} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\mu}{k} \left[\frac{\partial^k g(t)}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{\mu-k} f(t)}{\partial t^{\mu-k}} \right], \quad \mu > 0 \quad (2.54)$$

é válida.

Considere o seguinte caso: suponha que $\mu > 0$ e que p é um inteiro positivo. Então certamente, a derivada fracionária de $t^p f(t)$, dada por (2.49), existe para qualquer função f de classe \mathbf{C} . Sendo m o menor inteiro maior que μ , então pela definição de um operador fracionário [30] de $t^p f(x)$ de ordem $\mu > 0$ (se existe) é dado por,

$$\frac{\partial^\mu [f(t)t^p]}{\partial t^\mu} = \frac{\partial^m}{\partial t^m} \left[\frac{\partial^{-(m-\mu)} t^p f(t)}{\partial t^{-(m-\mu)}} \right]. \quad (2.55)$$

Mas de (2.53) substituindo q por $m - \mu > 0$,

$$\frac{\partial^{-m+\mu} [f(t)t^p]}{\partial t^{-m+\mu}} = \sum_{k=0}^p \binom{\mu - m}{k} \left[\frac{\partial^k t^p}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-m+\mu-k} f(t)}{\partial t^{-m+\mu-k}} \right], \quad q > 0. \quad (2.56)$$

Para calcular $\frac{\partial^\mu [t^p f(t)]}{\partial t^\mu}$ é necessário encontrar a m -ésima derivada (ordinária) de (2.56). Trivialmente,

$$\frac{\partial^n \left[\frac{\partial^k t^p}{\partial t^k} \right]}{\partial t^n} = \frac{\partial^{n+k} t^p}{\partial t^{n+k}}, \quad n = 0, 1, \dots$$

e,

$$\frac{\partial^n \left[\frac{\partial^{-m+\mu-k} f(t)}{\partial t^{-m+\mu-k}} \right]}{\partial t^n} = \frac{\partial^{n-m+\mu-k} f(t)}{\partial t^{n-m+\mu-k}},$$

desde que f pertença ao espaço de funções \mathbf{C} , uma subclasse de \mathbf{C} . Impondo esta condição sobre f , escrevemos (2.55) como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\mu [f(t)t^p]}{\partial t^\mu} &= \sum_{k=0}^p \binom{\mu-m}{k} \frac{\partial^m}{\partial t^m} \left[\left[\frac{\partial^k t^p}{\partial t^k} \right] \left[\frac{\partial^{-m+\mu-k} f(t)}{\partial t^{-m+\mu-k}} \right] \right] = \\ &= \sum_{k=0}^p \binom{\mu-m}{k} \sum_{j=0}^m \binom{m}{j} \left[\frac{\partial^{j+k} t^p}{\partial t^{j+k}} \right] \left[\frac{\partial^{\mu-j-k} f(t)}{\partial t^{\mu-j-k}} \right]. \end{aligned} \quad (2.57)$$

A mudança dos índices mudos do somatório

$$r = j + k$$

$$s = k$$

permite escrever (2.57) como,

$$\frac{\partial^\mu [f(t)t^p]}{\partial t^\mu} = \sum_{r=0}^p \left[\sum_{s=0}^r \binom{\mu-m}{s} \binom{m}{r-s} \right] \left[\frac{\partial^r t^p}{\partial t^r} \right] \left[\frac{\partial^{\mu-r} f(t)}{\partial t^{\mu-r}} \right]. \quad (2.58)$$

Para calcular o somatório interno considere a identidade algébrica,

$$(1+x)^{\mu-m}(1+x)^m = (1+x)^\mu.$$

Se expandirmos os termos em parênteses pelo teorema binomial e compararmos os coeficientes das potências correspondentes de x , temos,

$$\sum_{s=0}^r \binom{\mu-m}{s} \binom{m}{r-s} = \binom{\mu}{r}, \quad (2.59)$$

conhecida como fórmula de convolução de Vandermonde. Assim, (2.58) torna-se,

$$\frac{\partial^\mu [f(t)t^p]}{\partial t^\mu} = \sum_{r=0}^p \binom{\mu}{r} \left[\frac{\partial^r t^p}{\partial t^r} \right] \left[\frac{\partial^{\mu-r} f(t)}{\partial t^{\mu-r}} \right], \quad \mu > 0. \quad (2.60)$$

Desde que p seja um inteiro positivo e f da classe \mathbf{C} e $t > 0$. Comparando (2.60) com (2.53) podemos ver que são idênticas com q substituído por $-\mu$, sendo que a última é válida para funções de classe \mathbf{C} , enquanto que a outra é válida para uma parte da subclasse \mathbf{C} . A equação (2.60) é adequada para nossa proposta. Oldham [27] usou em seu trabalho (2.54) quando ambas f e g são analíticas.

2.3.4 Operador Linear

A teoria do método da derivada fracionária está intimamente ligada com a teoria de operadores. Por este motivo, e pela importância do mesmo na aplicação da derivada fracionária, abrimos, aqui, um espaço para definir um operador linear e relembrar alguns conceitos.

Podemos dizer que um operador linear refere-se a uma operação matemática pela qual uma função $f(x)$ é convertida em uma outra, digamos, $g(x)$, isto é, $\mathcal{B}f(x) = g(x)$, onde \mathcal{B} é um operador. Ou ainda, usando uma definição de análise funcional, um operador linear é um mapeamento de um vetor linear em um outro vetor linear. Podemos citar alguns exemplos de operadores:

$$\text{Operador Diferencial: } \mathcal{B} \equiv \frac{d}{dx}, \quad \mathcal{B}f \equiv \frac{df}{dx}. \quad (2.61)$$

$$\text{Operador Integral: } \mathcal{B} \equiv \int_a^b dx' N(x, x'), \quad \mathcal{B}f \equiv \int_a^b dx' N(x, x')f(x'). \quad (2.62)$$

$$\text{Operador Identidade: } \mathcal{B} \equiv 1, \quad \mathcal{B}f \equiv f(x). \quad (2.63)$$

Se,

$$\mathcal{B}(af + bg) = a\mathcal{B}f + b\mathcal{B}g,$$

então, dizemos que \mathcal{B} é um operador linear. Cumpre observar que os operadores acima citados, são operadores lineares.

Agora, que os argumentos matemáticos necessários para a melhor compreensão da técnica da derivada fracionária já foram expostos, vamos descrever todo o processo que envolve a aplicação dessa técnica para a determinação da solução da equação de transporte.

2.3.5 Representação de um Operador em Termos de Derivada Fracionária

Queremos estabelecer uma derivada fracionária que represente a mesma aplicação de um dado operador linear.

Para isso, é conveniente usarmos a definição de Riemann-Liouville para derivadas fracionárias [27, 30],

$$\frac{\partial^q f}{\partial x^q} = \frac{1}{\Gamma(-q)} \int_0^x (x-s)^{-q-1} f(s) ds \quad \text{Re}(q) < 0. \quad (2.64)$$

A condição $\text{Re}(q) < 0$ não impõe qualquer séria restrição à definição, porque o operador considerado deve efetuar uma transformação contínua. Essa restrição é devido ao fato que, quando $\text{Re}(q) > 0$, os valores da função Gama oscilam. Na verdade, o que ocorre é que a função cresce no sentido positivo do tempo, passa por um tempo estacionário e depois decresce no sentido negativo, havendo uma variação temporal. A equação (2.64) é empregada para obter uma expressão geral para a ordem íntegro-diferencial.

Seja \mathcal{B} um operador linear expresso na forma integral,

$$\mathcal{B} = \int_0^x b(x, s)(\cdot) ds, \quad (2.65)$$

a equivalência dos operadores dá-se a partir da comparação dos respectivos núcleos das equações (2.64) e (2.65). De fato, o operador de derivada fracionária pode ser escrito na forma,

$$\frac{\partial^q}{\partial x^q} = \int_0^x \frac{(x-s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} (\cdot) ds. \quad (2.66)$$

Sendo assim, $\mathcal{B} = \frac{\partial^q}{\partial x^q}$ é satisfeito se os núcleos de ambos operadores forem iguais. Então igualando-os, temos,

$$\frac{(x-s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} = b(x, s). \quad (2.67)$$

Deste modo, a representação de \mathcal{B} como uma derivada fracionária é garantida pela existência de $q(x, s)$ que é a ordem da derivada, e também, a solução da equação (2.67). Esta função é obtida no caso quando \mathcal{B} é um operador de evolução, também chamado de propagador, isto é, quando uma simples aplicação de \mathcal{B} executa uma pequena perturbação sobre a função que descreve o sistema, isto permite que a partir do perfil inicial de uma função possamos acompanhar o que acontece com essa função ao longo do tempo, como se o sistema fosse visto quadro a quadro. O fato de \mathcal{B} ser um operador de evolução implica que $q(x, s)$ é aproximadamente a função nula, o que nos permite aproximar o lado esquerdo da equação (2.67) por Série de McLaurin em q . Considere,

$$\frac{(x-s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} = f(q). \quad (2.68)$$

Aproximando $f(q)$ por série de McLaurin, temos,

$$f(q) = f(0) + f'(0)q + \frac{f''(0)q^2}{2!} + \dots \quad (2.69)$$

onde,

$$f(0) = \frac{(x-s)^{-0-1}}{\Gamma(0)} \simeq 0, \quad (2.70)$$

pois, $\frac{1}{\Gamma(0)} = 0$, já que $\Gamma(0) = \infty$.

$$\begin{aligned} f'(0) &= \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{-(x-s)^{-q-1} \ln(x-s)}{\Gamma(-q)} + \frac{(x-s)^{-q-1} \psi(-q)}{\Gamma(-q)} \right] = \\ &= \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{-(x-s)^{-q-1} \ln(x-s)}{\Gamma(-q)} \right] + \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{(x-s)^{-q-1} \psi(-q)}{\Gamma(-q)} \right], \end{aligned} \quad (2.71)$$

com,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{-(x-s)^{-q-1} \ln(x-s)}{\Gamma(-q)} \right] = 0, \quad (2.72)$$

pois $\Gamma(0) = \infty$. E,

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{(x-s)^{-q-1} \psi(-q)}{\Gamma(-q)} \right] &= \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{(x-s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} \left(\frac{-\frac{\partial \Gamma(-q)}{\partial(-q)}}{\Gamma(-q)} \right) \right] = \\ &= \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{-(x-s)^{-q-1} \frac{\partial \Gamma(-q)}{\partial(-q)}}{(\Gamma(-q))^2} \right] = -1 \frac{1}{x-s} = \frac{1}{s-x}, \end{aligned} \quad (2.73)$$

Assim, substituindo (2.72) e (2.73) em (2.71), temos,

$$f'(0) = \frac{1}{s-x}. \quad (2.74)$$

Conseqüentemente, a equação (2.67) pode ser aproximada por,

$$\frac{(x-s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} = \frac{q}{s-x} + O(q^2). \quad (2.75)$$

Desprezando os termos de ordem maior ou igual a $O(q^2)$ e substituindo $\frac{q}{s-x}$ na equação (2.67), temos,

$$\frac{q}{s-x} = b(x, s), \quad (2.76)$$

de modo que se isolarmos q , obtemos,

$$q = b(x, s)(s-x). \quad (2.77)$$

Mais adiante, poderemos constatar que quando \mathcal{B} contém um operador diferencial, $q(x, s)$ está no espaço de distribuições, já que o núcleo irá conter derivadas da função delta de Dirac, uma vez que para reescrevermos a equação diferencial na forma integral são usadas propriedades dessa função e sua derivada. Apesar do fato da ordem íntegro-diferencial poder ser uma distribuição, é mais conveniente para fins computacionais lidar com funções contínuas. A dificuldade em lidar com distribuições pode ser superada considerando que a função delta de Dirac pode ser expressa como um caso limitante de funções contínuas.

Lembrando uma representação da função generalizada Delta de Dirac [29] dada por,

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{\pi(x^2 + \epsilon^2)}, \quad (2.78)$$

neste trabalho, consideramos a seguinte aproximação dessa função ,

$$\delta(x) \approx \frac{\epsilon}{\pi(x^2 + \epsilon^2)}, \quad (2.79)$$

onde o termo $\frac{1}{\pi}$ é o fator de normalização devido a seguinte propriedade,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1. \quad (2.80)$$

Mais adiante extendemos para o caso de problemas multidimensionais. Até este momento o que fizemos foi obter a ordem da derivada fracionária correspon-

dente a um operador de evolução arbitrário, a seguir usamos essa expressão obtida para calcular a solução de um problema de evolução usando a regra de derivada fracionária de produto de funções.

2.3.6 Solução de um Problema Usando a Regra Generalizada do Produto para Íntegro-Diferenciação

Para aplicar o operador de derivada fracionária sobre uma função que descreve o estado inicial de um sistema, empregamos a regra generalizada do produto ao invés da definição de Riemann-Liouville, pois esta foi usada para a obtenção da ordem da derivada fracionária, não fazendo, assim, sentido usá-la novamente, pois, deste modo, a técnica da derivada fracionária não teria consistência matemática. A regra generalizada do produto de funções para íntegro-diferenciação é uma extensão da regra do produto comum para derivadas, e é dada pela seguinte expressão,

$$\frac{\partial^q(fg)}{\partial x^q} = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{q}{j} \frac{\partial^j f}{\partial x^j} \frac{\partial^{q-j} g}{\partial x^{q-j}}. \quad (2.81)$$

Assumindo $g = 1$ e f a função de interesse, a equação acima pode ser escrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial^q(f)}{\partial x^q} = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{q}{j} \frac{\partial^{q-j}[1]}{\partial x^{q-j}} \frac{\partial^j f}{\partial x^j} \quad (2.82)$$

onde,

$$\binom{q}{j} = (-1)^j \frac{\Gamma(j-q)}{j! \Gamma(-q)} \quad (2.83)$$

e a derivada da função constante $g = 1$ é obtida usando a regra de íntegro-diferenciação para polinômios [27, 30],

$$\frac{\partial^{q-j}[1]}{\partial x^{q-j}} = \frac{\partial^{q-j}x^0}{\partial x^{q-j}} = \frac{x^{j-q}}{\Gamma(j+1-q)} \quad (2.84)$$

substituindo esta expressão na Eq.(2.82) temos,

$$\frac{\partial^q(f)}{\partial x^q} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{\Gamma(j-q)}{(j)!\Gamma(-q)} \frac{x^{j-q}}{\Gamma(j+1-q)} \frac{\partial^j f}{\partial x^j}, \quad (2.85)$$

onde $\Gamma(j+1-q) = (j-q)\Gamma(j-q)$, assim,

$$\frac{\partial_q(f)}{\partial x^q} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{x^{j-q}}{j!\Gamma(-q)(j-q)} \frac{\partial^j f}{\partial x^j} \quad (2.86)$$

e truncando o limite superior em j , obtemos a seguinte expressão,

$$\frac{\partial^q(f)}{\partial x^q} \approx \frac{x^{-q}}{\Gamma(-q)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-q)} \frac{\partial^j f}{\partial x^j}. \quad (2.87)$$

Na equação acima N é o número de termos necessários para obtermos a convergência com a precisão prescrita. Note que esta definição necessita somente do cálculo das N primeiras ordens inteiras de derivadas de f , isto é, somente as primeiras ordens usuais.

Uma vez obtida a expressão para a ordem fracionária q e depois escolhendo uma definição apropriada para aplicar o operador de derivada fracionária sobre a função que descreve o contorno inicial f_0 torna-se possível obter uma solução aplicando a potência do operador de evolução. Este operador é prontamente representado, levando-se em conta que a regra de composição para derivadas permanece válida para ordens de diferenciação fracionária. E é visto como,

$$f = \frac{\partial^{kq} f_0}{\partial x^q} = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j f_0}{\partial x^j}. \quad (2.88)$$

3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM UMA DIMENSÃO COM O NÚCLEO DE KLEIN-NISHINA

3.1 Introdução

Neste capítulo propomos uma solução para a equação de transporte em uma dimensão, independente do tempo, com o núcleo de Klein-Nishina, escrita em termos do comprimento de onda λ , através da aplicação da técnica da derivada fracionária. Consideramos, ainda, a dependência contínua do fluxo angular com a energia. A técnica consiste em reescrever a equação de transporte na forma integral, comparar o núcleo com o da definição de Riemann-Liouville e resolver a equação algébrica correspondente para encontrar a ordem íntegro-diferencial.

3.2 Formulação

Consideramos a equação de transporte dependente de forma contínua com a energia, escrita em termos de comprimento de onda do fóton, λ , independente do tempo, sem fonte externa [26],

$$\mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \psi(x, \lambda, \mu) = \int_{-1}^1 \int_0^\lambda \widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) \psi(x', \lambda', \mu') d\lambda' d\mu', \quad (3.1)$$

onde $\psi(x, \lambda, \mu)$ representa o fluxo angular de energia, $c(\lambda)$ o coeficiente de atenuação e o núcleo de espalhamento é escrito como,

$$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) = \frac{\lambda}{\lambda'} K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu), \quad (3.2)$$

onde $K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu)$ representa a seção de choque de espalhamento de Klein-Nishina para o espalhamento Compton [26] e é dado pela seguinte expressão,

$$K(\lambda' \rightarrow \lambda; \mu' \rightarrow \mu) = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left(\frac{\lambda'}{\lambda}\right)^2 \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu'), \quad (3.3)$$

onde N_A representa o número de Avogrado ($6,02 \times 10^{23}/\text{mol}$), Z , o número atômico, A , a massa atômica, ρ , a densidade do meio, $\delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu')$, a função generalizada Delta de Dirac e σ_T , a seção de choque de Thomson, representada pela seguinte expressão,

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 = 6,65245 \times 10^{-25} \text{ cm}^2. \quad (3.4)$$

No espalhamento Compton, homenagem a Arthur H. Compton (1892-1962), quem primeiro o observou e analisou em 1922, um fóton colide com um elétron, no qual o fóton perde energia e é desviado da direção original de sua trajetória. O efeito desse processo no fóton incidente é algo similar ao efeito que o espalhamento elástico por um núcleo atômico tem em um nêutron, isto é, em ambos os casos a partícula incidente sobrevive à colisão. Esse tipo de espalhamento é a reação predominante para fótons gamas com energias entre 1 Mev e 10 Mev para elementos de baixos e médios números atômicos. A teoria básica, envolvida neste efeito, que assume que o elétron seja livre e esteja em repouso, é de Klein e Nishina (1929).

A relação entre o desvio do fóton e a perda de energia para o espalhamento Compton, assumindo o elétron livre e em repouso, é determinada considerando a conservação do momento e da energia entre o fóton e o elétron recuado. Esta relação pode ser expressa por,

$$\frac{E}{E_0} = \frac{1}{1 + \left(\frac{E_0}{m_e c^2}\right)(1 - \cos(\theta))}, \quad (3.5)$$

onde E_0 e E são, respectivamente, as energias do fóton antes e depois da colisão em Mev, $m_e c^2$ é a energia restante do elétron e θ é o ângulo de deflexão do fóton.

Neste trabalho, é mais conveniente usar, ao invés de considerar energia variável, o comprimento de onda do fóton em unidades de Compton [26],

$$\lambda_0 = \frac{0.511}{E_0[MeV]} \quad (3.6)$$

onde E_0 é a energia do fóton incidente no meio. O aumento no comprimento de onda associado com o espalhamento Compton é dado por,

$$\lambda - \lambda_0 = 1 - \cos(\theta) \quad (3.7)$$

onde λ_0 é o comprimento de onda do fóton antes do espalhamento e λ , depois do espalhamento. O valor máximo do comprimento de onda é 2 unidades de Compton, e ocorre quando o fóton sofre um desvio de 180° .

A integral em λ , na equação (3.1), é calculada desde o limite máximo de energia para o fóton, λ_0 , até o limite mínimo de energia, $\lambda_0 + 2$.

Assim a equação (3.1) pode ser escrita da seguinte forma,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \psi(x, \lambda, \mu) = \\ = & \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \\ & \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu') \psi(x', \lambda', \mu') d\lambda' d\mu' \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para obtermos a solução da equação de transporte em uma dimensão usando derivada fracionária é necessário reescrever, termo a termo do lado esquerdo da equação (3.8), na forma integral. Usando a aproximação da função generalizada Delta de Dirac expressa por,

$$\delta(x) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon^2}{(x^2 + \epsilon^2)}, \quad (3.9)$$

e considerando que a derivada de primeira ordem pode ser dada por,

$$\frac{df}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\delta(x - x')] f(x') dx', \quad (3.10)$$

temos,

$$c(\lambda)\psi(x, \lambda, \mu) = c(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')\psi(x', \lambda, \mu)dx'. \quad (3.11)$$

Deste modo, podemos reescrever o lado esquerdo da equação (3.8) como,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')\psi(x', \lambda, \mu)dx' \quad (3.12)$$

Assim, reescrevendo a equação (3.8) temos,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')\psi(x', \lambda, \mu)dx' = \\ & = \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \\ & \quad \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu')\psi(x', \lambda', \mu')d\lambda'd\mu'. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Aplicando a propriedade da função generalizada Delta de Dirac, mostrada no Capítulo 2, (2.80), duas vezes, temos,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \delta(x - x')\delta(\mu - \mu')\delta(\lambda - \lambda')\psi(x', \lambda', \mu')d\lambda'd\mu'dx' = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \times \\ & \quad \times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu')\delta(x - x')\psi(x', \lambda', \mu')d\lambda'd\mu'dx' \end{aligned} \quad (3.14)$$

Sendo assim, podemos aproximar a equação de transporte em uma dimensão, por,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi(x, \lambda, \mu)}{\partial x} &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} k(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu') \psi(x', \lambda', \mu') d\lambda' d\mu' dx' = \mathcal{A}\psi, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde o núcleo da equação de transporte $k(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu')$ é dado por,

$$\begin{aligned} k(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu') &= \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \\ &\delta(1 + \lambda' - \lambda - \mu\mu') \delta(x - x') - c(\lambda) \delta(x - x') \delta(\mu - \mu') \delta(\lambda - \lambda'). \end{aligned} \quad (3.16)$$

A solução formal da equação integral (3.13) é dada pela seguinte expressão,

$$\psi = \left[e^{x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} k(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu') \psi(x', \lambda', \mu') d\lambda' d\mu' dx'} \right] \psi_0, \quad (3.17)$$

onde ψ_0 representa o fluxo angular inicial. Não existem regras, na estrutura da Álgebra de Lie, para calcular a solução de uma equação como esta, isto é, para o exponencial deste tipo de operador integral. Por exemplo, considerando-se a seguinte equação,

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \mathcal{B}f. \quad (3.18)$$

A solução da equação (3.18) é da forma,

$$f = f_0 e^{\mathcal{B}x} \quad (3.19)$$

quando \mathcal{B} não for um operador. Mas estamos trabalhando com uma equação, cuja solução formal apresenta um operador integral, neste caso obtemos a seguinte solução,

$$f = [e^{\mathcal{B}x}]f_0. \quad (3.20)$$

onde $[e^{\mathcal{B}x}]f_0$ é calculado aplicando a potência do operador, já que,

$$[e^{\mathcal{B}x}] = I + x\mathcal{B} + \frac{x^2}{2}\mathcal{B}^2 + \dots \quad (3.21)$$

Entretanto, para evitarmos a cálculo da potência de operadores e para que este obstáculo possa ser removido, vamos aproximar esta solução, por,

$$\begin{aligned} \psi = [\mathcal{I} + \frac{x}{\mu}\mathcal{A}]\psi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} [\delta(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu') + \\ k(x, \lambda, \mu, x', \lambda', \mu')] \psi_0(x, \mu, \lambda, x', \mu', \lambda') d\lambda' d\mu' dx', \end{aligned} \quad (3.22)$$

válido para valores próximos à fronteira, mas como estamos trabalhando com a potência do operador de derivada fracionária, podemos estender este resultado para todo o domínio.

Neste momento, cumpre observar, que está sendo usada uma aproximação linear para $[e^{\mathcal{B}x}]$, isto deve-se ao fato de que estamos considerando o problema evoluindo com Δx pequeno e supondo regularidade do operador.

O operador linear \mathcal{B} é então escrito como uma derivada fracionária com ordem variável, por,

$$\frac{\partial^q}{\partial x^q} = \mathcal{B}. \quad (3.23)$$

Uma vez encontrada a expressão para a ordem da derivada fracionária, q , após a comparação dos núcleos correspondentes e resolvida a equação algébrica resultante para q , como mostrado no Capítulo 2, temos a seguinte solução para a equação de transporte (3.8),

$$\psi = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}. \quad (3.24)$$

4 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM DUAS DIMENSÕES CONSIDERANDO ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO

4.1 Introdução

Neste capítulo descrevemos a aplicação da técnica da derivada fracionária para a obtenção da solução para a equação de transporte em duas dimensões, independente do tempo, numa placa plana, considerando espalhamento isotrópico com fonte externa. A técnica consiste em reescrever a equação de transporte na forma integral, comparar o núcleo com o da definição de Riemann-Liouville e resolver a equação algébrica correspondente para encontrar a ordem íntegro-diferencial. Mas, primeiramente, fazemos uma extensão da técnica da derivada fracionária para problemas bidimensionais.

4.2 Extensão para Problemas em Duas Dimensões

Para resolvermos problemas bidimensionais, é necessário introduzirmos o conceito de derivadas fracionárias parciais. A extensão desta aproximação para duas variáveis é obtida resolvendo,

$$\frac{\partial^{q_x+q_y}}{\partial x^{q_x+q_y}} = \mathcal{B}, \quad (4.1)$$

cuja forma equivalente em termos de núcleo é dada por,

$$\frac{(x - s_x)^{-q_x-1}}{\Gamma(-q_x)} \frac{(y - s_y)^{-q_y-1}}{\Gamma(-q_y)} = b(x, y, s_x, s_y), \quad (4.2)$$

onde s_x e s_y representam, respectivamente, as variáveis mudas de integração relacionadas a x e y . Existem infinitas soluções para a equação (4.2), já que nenhuma restrição sobre cada ordem íntegro-diferencial está disponível. Uma possível solução é obtida fazendo $q_y = 0$. Isto implica o seguinte resultado,

$$q = q_x = (s_x - x)b(x, y, s_x, s_y). \quad (4.3)$$

4.3 Formulação

Consideramos a equação de transporte em duas dimensões, invariante no tempo, com espalhamento isotrópico em meio homogêneo,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi(x, y, \mu, \eta)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, \mu, \eta)}{\partial y} + \sigma_t \psi(x, y, \mu, \eta) = \\ = \sigma_s \int_{-1}^1 \int_0^1 \psi(x', y', \mu', \eta') d\eta' d\mu' + Q(x, y), \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde $\psi(x, y, \mu, \eta)$ representa o fluxo angular de partículas nas direções $-1 \leq \mu \leq 1$ e $0 \leq \eta \leq 1$, σ_t , a seção de choque total e σ_s , a seção de espalhamento. Note que σ_s é uma constante, já que estamos considerando espalhamento isotrópico. Temos, ainda, $Q(x, y)$ que representa a fonte externa.

A solução da equação de transporte (4.4) será da seguinte forma,

$$\psi(x, y, \mu, \eta) = \psi_h(x, y, \mu, \eta) + \psi_p(x, y, \mu, \eta), \quad (4.5)$$

onde $\psi_h(x, y, \mu, \eta)$ representa a solução homogênea e $\psi_p(x, y, \mu, \eta)$, a solução particular.

Para obtermos a solução homogênea da equação de transporte em duas dimensões usamos a técnica da derivada fracionária, considerando a seguinte equação,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial y} + \sigma_t \psi(x, y, \Omega) = \sigma_s \int_{-1}^1 \int_0^1 \psi(x, y, \Omega') d\Omega', \quad (4.6)$$

onde Ω representa o vetor ângulo nas direções (μ, η) .

Para a aplicação dessa técnica, é necessário, primeiramente, reescrevermos o lado esquerdo da equação (4.6) na forma integral. Usando a aproximação da função generalizada Delta de Dirac,

$$\delta(x) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon^2}{(x^2 + \varepsilon^2)} \quad (4.7)$$

e considerando que a derivada de primeira ordem pode ser expressa como,

$$\frac{df}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\delta(x - x')] f(x') dx' \quad (4.8)$$

temos,

$$\eta \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial y} = \eta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(x - x') \psi(x', y', \Omega) dx' dy' \quad (4.9)$$

$$\sigma_t \psi(x, y, \Omega) = \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(x', y', \Omega) dx' dy' \quad (4.10)$$

Assim o lado esquerdo da equação (4.6) pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial y} + \sigma_t \psi(x, y, \Omega) &= \mu \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial x} + \\ &+ \eta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(x - x') \psi(x', y', \Omega) dx' dy' + \\ &+ \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(x', y', \Omega) dx' dy' \end{aligned} \quad (4.11)$$

Usando a propriedade da função generalizada Delta de Dirac (2.80), temos,

$$\begin{aligned}
& \mu \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial x} + \\
& + \eta \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(x - x') \delta(\Omega - \Omega') \psi(x', y', \Omega) d\Omega' dx' dy' + \\
& + \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 \delta(y - y') \delta(x - x') \delta(\Omega - \Omega') \psi(x', y', \Omega) d\Omega' dx' dy' = \\
& = \sigma_s \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 \delta(y - y') \delta(x - x') \psi(x', y', \Omega) d\Omega' dx' dy',
\end{aligned} \tag{4.12}$$

onde,

$$\delta(\Omega - \Omega') = \delta(\mu - \mu') \delta(\eta - \eta'). \tag{4.13}$$

Conseqüentemente, é possível aproximar a equação de transporte em duas dimensões por,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, y, \Omega)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 k(x, y, \Omega, x', y', \Omega') \psi(x', y', \Omega') d\Omega' dx' dy' = \mathcal{A}\psi, \tag{4.14}$$

onde,

$$\begin{aligned}
k(x, y, \Omega, x', y', \Omega') &= \sigma_s \delta(x - x') \delta(y - y') - \\
&- \sigma_t \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(\Omega - \Omega') - \eta \delta_y(y - y') \delta(x - x') \delta(\Omega - \Omega'),
\end{aligned} \tag{4.15}$$

é o que chamamos de núcleo da equação de transporte.

Na equação acima o y subscripto indica a derivada da função generalizada Delta de Dirac com respeito à variável espacial. Por exemplo,

$$\delta_y(y - y') = \frac{\partial}{\partial y}[\delta(y - y')] \quad (4.16)$$

A solução formal da equação integral (4.14) é dada por,

$$\psi = \left[e^{x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 k(x, y, \mu, x', y', \Omega') \psi(x', y', \Omega') d\Omega' dx' dy'} \right] \psi_0, \quad (4.17)$$

onde ψ_0 representa o fluxo angular inicial. Como já foi visto na seção (3.2), na estrutura da Álgebra de Lie, não existe uma regra para calcular o exponencial deste tipo de operador integral.

Entretanto, este obstáculo pode ser transposto aproximando-se esta solução por,

$$\begin{aligned} \psi = \left[\mathcal{I} + \frac{x}{\mu} \mathcal{A} \right] \psi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^1 [\delta(x, y, \Omega, x', y', \Omega') + \\ + k(x, y, \Omega, x', y', \Omega')] \psi_0(x, y, \Omega, x', y', \Omega') d\Omega' dx' dy', \end{aligned} \quad (4.18)$$

válido para valores próximos à fronteira.

O operador linear \mathcal{B} é então escrito como uma derivada fracionária com ordem variável, por,

$$\frac{\partial^q}{\partial x^q} = \mathcal{B}. \quad (4.19)$$

Uma vez encontrada a expressão para a ordem da derivada fracionária, q , após a comparação dos núcleos correspondentes e resolvida a equação algébrica resultante para q , como mostrado no Capítulo 2, temos a seguinte solução para a equação de transporte (4.6),

$$\psi = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j - kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}. \quad (4.20)$$

Vamos agora resolver a segunda parte do nosso problema: encontrar o que chamamos de solução particular da equação, dada por $\psi_p(x, y, \mu, \eta)$ em (4.5). Para isto, consideramos a fonte externa $Q(x, y)$ como sendo uma condição de contorno. Assim, calculamos a solução particular da equação de transporte usando a mesma formulação empregada para a obtenção da solução homogênea, com uma única diferença: o sinal da ordem da derivada fracionária será negativo. Ou seja, considerando a seguinte equação,

$$\mathcal{B}f = g. \quad (4.21)$$

A solução da equação (4.21) é dada por,

$$f = \mathcal{B}^{-1}g. \quad (4.22)$$

Como \mathcal{B} é um operador, dado por,

$$\mathcal{B} = \frac{\partial^q}{\partial x^q} \quad (4.23)$$

temos,

$$\mathcal{B}^{-1} = \frac{\partial^{-q}}{\partial x^{-q}} \quad (4.24)$$

Sendo assim, considerando $g = Q(x, y)$, temos,

$$\psi_p(x, y, \mu, \eta) = \frac{\partial^{-q}}{\partial x^{-q}} Q(x, y). \quad (4.25)$$

Portanto, a solução da equação de transporte (4.4), é dada por,

$$\psi(x, y, \mu, \eta) = \psi_h(x, y, \mu, \eta) + \psi_p(x, y, \mu, \eta) = \frac{\partial^{kq}}{\partial x^{kq}} \psi_0 + \frac{\partial^{-q}}{\partial x^{-q}} Q(x, y) \quad (4.26)$$

onde,

$$\frac{\partial^{kq}}{\partial x^{kq}} \psi_0 = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j} \quad (4.27)$$

e,

$$\frac{\partial^{-q}}{\partial x^{-q}} Q(x, y) = \frac{x^q}{\Gamma(q)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j+q)} \frac{\partial^j Q(x, y)}{\partial x^j} \quad (4.28)$$

5 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM TRÊS DIMENSÕES COM O NÚCLEO DE RUTHERFORD

5.1 Introdução

Neste capítulo, aplicamos a técnica da derivada fracionária na equação de transporte em três dimensões, em geometria cartesiana, considerando como seção de choque de espalhamento diferencial o núcleo de Rutherford [36] para a obtenção de sua solução. A técnica, como já foi citado nos capítulos anteriores, consiste em reescrever a equação de transporte na forma integral, comparar o núcleo da respectiva solução formal com o da definição de Riemann-Liouville e resolver a equação algébrica correspondente para encontrar a ordem íntegro-diferencial. Fazemos, ainda, uma extensão da técnica da derivada fracionária para problemas tridimensionais, usando raciocínio análogo ao utilizado para problemas bidimensionais.

5.2 Extensão para Problemas em Três Dimensões

O resultado mostrado no Capítulo 4 pode ser facilmente estendido para problemas em três dimensões, basta considerarmos,

$$\frac{\partial^{q_x+q_y+q_z}}{\partial x^{q_x+q_y+q_z}} = \mathcal{B}, \quad (5.1)$$

cuja forma equivalente em termos de núcleo é dada por,

$$\frac{(x - s_x)^{-q_x-1}}{\Gamma(-q_x)} \frac{(y - s_y)^{-q_y-1}}{\Gamma(-q_y)} \frac{(z - s_z)^{-q_z-1}}{\Gamma(-q_z)} = b(x, y, z, s_x, s_y, s_z), \quad (5.2)$$

onde s_x , s_y e s_z representam, respectivamente, as variáveis mudas de integração relacionadas a x , y e z . Existem infinitas soluções para a equação (5.2), já que

nenhuma restrição sobre cada ordem íntegro-diferencial é feita. Uma possível solução é obtida fazendo $q_y = q_z = 0$, o que implica o seguinte resultado,

$$q = q_x = (s_x - x)b(x, y, s_x, s_y, s_z). \quad (5.3)$$

5.3 Formulação

Considere o seguinte problema tridimensional de transporte descrito pela equação (5.4), para um feixe de elétrons invariante no tempo,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial x} + \\ & + \sqrt{1 - \mu^2} \left(\cos(\varphi) \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial y} + \sin(\varphi) \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \varphi)}{\partial z} \right) + \sigma_t \psi(x, y, z, \mu, \varphi) = \\ & = \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{a}{(b - \mu)^2} \psi(x', y', z', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu'. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Na equação (5.5), usou-se no termo integral, a secção de choque de espalhamento diferencial de Rutherford [36], onde,

$$a = \frac{1}{2\pi\bar{\lambda}} \cdot 2\eta(\eta + 1), \quad a > 0 \quad (5.5)$$

e,

$$b = 1 + 2\eta, \quad (5.6)$$

com $\bar{\lambda} = \frac{1}{\sigma_t}$ indicando o livre caminho médio percorrido pelas partículas no meio. Ainda nas equações (5.5) e (5.6) temos uma constante, $\eta > 0$, dada por,

$$\eta = \frac{h^2 Z^{\frac{2}{3}}}{4(a_H)^2 (mv)^2}, \quad (5.7)$$

sendo h a constante de Planck ($=6,63 \times 10^{-34}$ J.s), a_H o raio de Bohr ($=5,29 \times 10^{-11}$ m), Z o número atômico do material que está sendo irradiado e mv o momento do elétron que está sofrendo espalhamento ($m=9,11 \times 10^{-31}$ Kg e $v=10^4$ m/s). Temos ainda, σ_t e $\psi(x, y, z, \mu, \varphi)$ que representam, respectivamente, a seção de choque total e o fluxo angular de partículas nas direções $-1 \leq \mu \leq 1$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

O espalhamento de Rutherford [36], é um dos modelos mais simples de espalhamento elástico de elétrons. É obtido sem levar em consideração efeitos relativistas, e por isso não é um modelo realista do transporte de elétrons quando estamos tratando de energias por volta de 10Mev. Neste caso é mais apropriado o uso de um outro tipo de seção de choque, a de Mott [36].

Para obtermos a solução da equação de transporte em três dimensões usando derivada fracionária, é necessário reescrever o lado esquerdo da equação (5.5) na forma integral. Usando a aproximação da função Delta de Dirac representada pela equação (2.79) e considerando que,

$$\frac{df}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\delta(x - x')] f(x') dx' \quad (5.8)$$

temos,

$$\sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial y} = \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(z - z') \delta(x - x') \psi(r', \mu, \varphi) dr' \quad (5.9)$$

$$\sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial z} = \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} [\delta(z - z')] \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(r', \mu, \varphi) dr' \quad (5.10)$$

$$\sigma_t \psi(r, \mu, \varphi) = \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \delta(z - z') \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(r', \mu, \varphi) dr' \quad (5.11)$$

onde r representa as coordenadas x , y e z e r' , x' , y' e z' .

Assim o lado esquerdo da equação (5.5) pode ser escrito como,

$$\begin{aligned}
& \mu \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial x} + \sqrt{1 - \mu^2} \left(\cos(\varphi) \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial y} + \sin(\varphi) \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial z} \right) + \sigma_t \psi(r, \mu, \varphi) = \quad (5.12) \\
& = \mu \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial x} + \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(z - z') \delta(x - x') \psi(r', \mu, \varphi) dr' + \\
& + \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} [\delta(z - z')] \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(r', \mu, \varphi) dr' + \\
& + \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \delta(z - z') \delta(x - x') \delta(y - y') \psi(r', \mu, \varphi) dr'.
\end{aligned}$$

Usando a propriedade da função generalizada Delta de Dirac (2.80),

temos,

$$\begin{aligned}
& \mu \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial x} + \quad (5.13) \\
& + \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta_y(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' + \\
& + \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta_z(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' + \\
& + \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr'.
\end{aligned}$$

Na equação (5.14) x , y e z subscritos denotam a derivada da função generalizada Delta de Dirac com respeito às variáveis espaciais. Por exemplo,

$$\delta_y(r - r') = \frac{\partial}{\partial y} [\delta(y - y')] \delta(z - z') \delta(x - x'). \quad (5.14)$$

Reescrevendo a equação (5.5), temos,

$$\begin{aligned}
& \mu \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial x} + \tag{5.15} \\
& + \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta_y(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' + \\
& + \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta_z(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' + \\
& + \sigma_t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu') \psi(r', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' = \\
& = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \frac{a}{(b - \mu)^2} \delta(r - r') \psi(x', y', z', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr',
\end{aligned}$$

que pode ser escrita na forma,

$$\mu \frac{\partial \psi(r, \mu, \varphi)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} k(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi') \psi(x', y', z', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr' = \mathcal{A}\psi, \tag{5.16}$$

onde,

$$\begin{aligned}
k(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi') &= \frac{a}{(b - \mu)^2} \delta(r - r') - (\sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi) \delta_y(r - r') \tag{5.17} \\
& - \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\varphi) \delta_z(r - r') + \sigma_t \delta(r - r') \delta(\varphi - \varphi') \delta(\mu - \mu').
\end{aligned}$$

A solução formal da equação (5.18) é dada por,

$$\psi = \left[e^{x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} k(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi') \psi(x', y', z', \mu', \varphi') d\varphi' d\mu' dr'} \right] \psi_0, \tag{5.18}$$

onde ψ_0 representa o fluxo angular inicial. Como já foi dito nos Capítulos 3 e 4, não conhecemos nenhuma regra, na estrutura da Álgebra de Lie, para obter a solução dessa equação, já que temos uma exponencial de um operador integral. Sendo assim, a solução da equação (5.18) pode ser aproximada por,

$$\psi = \left[\mathcal{I} + \frac{x}{\mu} \mathcal{A} \right] \psi_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} [\delta(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi') + k(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi')] \psi_0(r, r', \mu, \mu', \varphi, \varphi') d\varphi' d\mu' dr'. \quad (5.19)$$

Escrevendo o operador linear \mathcal{B} como uma derivada fracionária com ordem variável, temos,

$$\frac{\partial^q}{\partial x^q} = \mathcal{B}. \quad (5.20)$$

Uma vez encontrada a expressão para a ordem da derivada fracionária, q , após a comparação dos núcleos correspondentes e resolvida a equação algébrica resultante para q , como mostrado no Capítulo 2, temos a seguinte solução para a equação de transporte (5.5),

$$\psi = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}. \quad (5.21)$$

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, aplicamos o método da derivada fracionária para o cálculo da taxa de dose em problemas unidimensionais e fluxo angular em problemas bidimensionais e tridimensionais, bem como, testamos as diversas representações da função generalizada Delta de Dirac.

A metodologia proposta para obter essas quantidades segue as seguintes etapas:

1. Definir a aproximação, mais adequada, para a função generalizada de Delta de Dirac e sua derivada de primeira ordem a serem usadas na resolução do problema considerado. Neste trabalho, consideramos quatro aproximações diferentes para essa função [29],

$$\delta(x) \approx \frac{\epsilon}{\pi(x^2 + \epsilon^2)}, \quad (6.1)$$

$$\delta(x) \approx \frac{\epsilon^2}{\pi(x^2 + \epsilon^2)}, \quad (6.2)$$

$$\delta(x) \approx \sqrt{\frac{1}{\epsilon\pi}} e^{-\frac{x^2}{\epsilon}}, \quad (6.3)$$

e,

$$\delta(x) \approx \frac{\sin(\frac{1}{\epsilon}x)}{\pi x}. \quad (6.4)$$

Lembramos que as aproximações citadas acima, são provenientes das representações da função generalizada Delta de Dirac onde tomamos o limite com $\epsilon \rightarrow 0$.

Escolhemos trabalhar com a aproximação (6.21) para a função generalizada Delta de Dirac, por se tratar da que apresentou os melhores resultados, já

que para as demais os resultados divergiram.

2. Reescrever a equação de transporte na forma integral definindo, assim, o núcleo dessa equação. Desta forma, a equação será escrita como,

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} = \int \int \int k(r, r', \Omega, \Omega') \psi(r', \Omega') d\Omega' dr', \quad (6.5)$$

onde, r e r' representam os vetores posição, Ω e Ω' os vetores direção e o número de integrais e os limites de integração dependem do problema que está sendo considerado.

3. Obter a ordem da derivada fracionária que aproxima o operador de evolução, utilizando uma extensão da regra de Leibniz para a derivada do produto. Isto é, resolver a equação resultante da comparação dos núcleos do operador linear, definido na forma integral, com o da definição de Riemann-Liouville,

$$b(x, s) = \frac{(x - s)^{-q-1}}{\Gamma(-q)} \approx \frac{q}{s - x} \quad (6.6)$$

o que resulta,

$$q = (s - x)b(x, s) \quad (6.7)$$

onde q é a ordem da derivada fracionária e $b(x, s)$ o núcleo da equação de transporte.

4. Especificar a condição inicial para o problema em questão.

5. E, finalmente, aplicar a derivada fracionária sobre o fluxo angular, através da seguinte expressão,

$$\psi = \frac{\partial^q \psi_0}{\partial x^q} = \frac{x^{-q}}{\Gamma(-q)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-q)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}, \quad (6.8)$$

onde N é o número de termos da série.

Desta forma, o fluxo angular, solução da equação de transporte, está

perfeitamente determinado ao tomarmos a potência do operador. A partir do valor do fluxo angular, podemos calcular o fluxo escalar, que nos permitirá o cálculo da taxa de dose absorvida em uma região irradiada.

Fizemos a implementação computacional usando o software Maple 7.0 em um microcomputador PC, Pentium III, 1.1 GB, com um tempo máximo de processamento de 1 minuto.

Neste capítulo ainda são apresentados os resultados numéricos obtidos, para as quantidades citadas anteriormente, através da aplicação da metodologia proposta.

6.1 Cálculo dos Fluxos Angular e Escalar em Uma Dimensão

Para a análise da formulação proposta, para o caso da equação de transporte em uma dimensão, considerando o núcleo de Klein-Nishina para o espalhamento Compton, calculamos os fluxos angular e escalar em uma camada de água de 20 cm de espessura, considerando um feixe de fótons com uma energia inicial de 2 Mev.

O fluxo angular foi obtido a partir da aplicação da técnica da derivada fracionária na equação de transporte em uma dimensão, e pode ser escrito como,

$$\psi(x, \mu, \lambda) = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}. \quad (6.9)$$

Sendo assim, o fluxo escalar de partículas é obtido integrando-se o fluxo angular na direção μ e é dado por,

$$\psi(x, \lambda) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu, \lambda) d\mu, \quad (6.10)$$

onde $\psi(x, \mu, \lambda)$ representa o fluxo angular, solução da equação de transporte obtida através da aplicação do método da derivada fracionária exposto no Capítulo 2.

Mais precisamente, o fluxo escalar foi obtido considerando-se o intervalo que vai de λ_0 até $\lambda_0 + 2$, limites máximo e mínimo de energia para o fóton, respectivamente.

Cumpramos ressaltar, que foram considerados 5 grupos de energia a fim de que fosse possível uma comparação com os resultados disponíveis na literatura.

Assim,

$$\begin{aligned} \psi(x)_{Total} = \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \psi(x, \lambda) d\lambda &= \overbrace{\int_{\lambda_0}^{\lambda_0+\Delta\lambda} \psi(x, \lambda) d\lambda}^{\psi_1} + \\ &+ \underbrace{\int_{\lambda_0+\Delta\lambda}^{\lambda_0+2\Delta\lambda} \psi(x, \lambda) d\lambda}_{\psi_2} + \underbrace{\int_{\lambda_0+2\Delta\lambda}^{\lambda_0+3\Delta\lambda} \psi(x, \lambda) d\lambda}_{\psi_3} + \underbrace{\int_{\lambda_0+3\Delta\lambda}^{\lambda_0+4\Delta\lambda} \psi(x, \lambda) d\lambda}_{\psi_4} + \underbrace{\int_{\lambda_0+4\Delta\lambda}^{\lambda_0+5\Delta\lambda} \psi(x, \lambda) d\lambda}_{\psi_5} \end{aligned} \quad (6.11)$$

e,

$$\Delta = \frac{2}{5} = \frac{\text{Comprimento do intervalo}}{\text{Níveis de energia}},$$

onde $\psi(x)_{Total}$ representa o fluxo escalar.

As integrais representadas em (6.11) foram aproximadas pela regra de Simpson usando uma ordem de quadratura igual a 4,

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{4}b - \frac{1}{4}a \right) \left(f(a) + f(b) + 4f\left(\frac{3}{4}a + \frac{1}{4}b\right) + 4f\left(\frac{1}{4}a + \frac{3}{4}b\right) + 2f\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right) \right). \quad (6.12)$$

Os resultados numéricos apresentados nesse trabalho, foram obtidos a partir dos dados apresentados nas tabelas do Apêndice B, que contêm os valores para os coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando a Regra de Simpson, para feixes de fótons com energias incidentes de 1,25 Mev e 2 Mev,

respectivamente. Como esses resultados são apenas para o caso de multigrupos de energia, e estamos considerando o fluxo angular dependente da energia de forma contínua, foi necessário um ajuste de curvas, no qual utilizamos um polinômio interpolador de grau 4 e o método dos Mínimos Quadrados. Esse ajuste permitiu-nos o cálculo de alguns parâmetros não encontrados nas tabelas (C.1) e (C.2), mas de importância fundamental para o cálculo do fluxo escalar.

Na tabela (6.1) são apresentados os valores obtidos para o fluxo escalar em uma camada de água de 20 cm de espessura, considerando um feixe de fótons com energia inicial de 2 Mev. Para a obtenção destes dados foi usada a aproximação da função generalizada Delta de Dirac dada pela expressão (6.21).

Tabela 6.1: *Fluxo escalar (fótons/cm²s) em uma camada de água de 20 cm de espessura e fótons com energia inicial de 2 Mev.*

Método	x (cm)	$\psi_1(x)$	$\psi_2(x)$	$\psi_3(x)$	$\psi_4(x)$	$\psi_5(x)$
LTS _N , N=2	20	.369852	.139113	.69425e-01	.781669e-01	.385271e-01
D. Fracionária	20	.273247	.128352	.64868e-01	.727490e-01	.347536e-01

Os valores obtidos para os fluxos escalares numa camada d'água de espessura de 20 cm, através do método da derivada fracionária, apresentam razoável concordância com os calculados pelo método LTS_N [37, 38, 39]. A pequena diferença entre os valores deve-se ao fato de que estamos considerando o problema em meio infinito. A medida que aumentarmos a espessura da camada d'água, os resultados tendem a apresentar uma precisão ainda melhor, devido ao fato de estarmos aproximando-nos do que pode ser considerado um meio infinito.

Calculamos, ainda, os valores obtidos para o fluxo angular, considerando, agora, uma camada d'água de 100 cm de espessura e uma energia do feixe incidente de fótons igual a 1,25 Mev. Os resultados obtidos são apresentados na tabela (6.2).

Resultados para fluxos escalares para domínios de maior espessura não foram encontrados na literatura, mas a partir do trabalho realizado em [38] é possível fazer uma comparação entre o resultado obtido para o cálculo da taxa de dose pelo método LTS_N e o método da derivada fracionária, resultados, estes, que serão apre-

sentados na seção (5.4.1). Esta comparação, apesar de não ser precisa, pois estamos trabalhando em meio infinito, nos permite afirmar que os valores obtidos para os fluxos escalares são compatíveis com os apresentados em [38], já que apresentam a mesma ordem de grandeza. Para este exemplo também foi utilizada a aproximação (6.21) para a função generalizada Delta de Dirac.

Tabela 6.2: *Fluxo escalar (fótons/cm²s) em uma camada de água de 100 cm de espessura e fótons com energia inicial de 1,25 Mev.*

Método	x (cm)	$\psi_1(x)$	$\psi_2(x)$	$\psi_3(x)$	$\psi_4(x)$	$\psi_5(x)$
D. Fracionária	100	.0156194	.690642e-02	.349627e-02	.176211e-02	.782895e-03

6.2 Cálculo do Fluxos Angular e Escalar em Duas Dimensões

A formulação do método da derivada fracionária, para o caso bidimensional, foi aplicada a problemas em meios homogêneos, considerando espalhamento isotrópico em uma placa quadrada com 100 cm de lado, fonte emissora de nêutrons emitindo 1 nêutron/cm²s, localizada em um dos vértices da placa, conforme a figura (6.1), mantendo as demais condições constantes. Para a aplicação da técnica da derivada fracionária foi necessário escrever a fonte na forma de uma função. Assim, a fonte emissora de nêutrons foi escrita na seguinte forma,

$$Q(x, y) = H(1 - x) \cdot H(1 - y), \quad (6.13)$$

onde H representa a função de Heaviside, que pode ser aproximada por,

$$H = \frac{\epsilon}{\pi} \cdot \arctan\left(\frac{x}{\epsilon}\right). \quad (6.14)$$

O fluxo escalar é dado pela seguinte expressão,

$$\psi(x, y) = \int_{-1}^1 \int_0^1 \psi(x, y, \mu, \eta) d\eta d\mu. \quad (6.15)$$

Conhecendo-se o fluxo escalar, a corrente parcial de nêutrons, J , emergentes do trecho do contorno indicado na figura (6.1) como região de fuga, que representa a fuga de nêutrons ao longo de um trecho do contorno do domínio, é calculada integrando-se o fluxo escalar obtido na equação (6.15) na região considerada,

$$J = \int_a^b \psi(x, b) dx + \int_c^d \psi(d, y) dy, \quad (6.16)$$

onde $a = x_{\text{mim}}$, $b = x_{\text{máx}}$, $c = y_{\text{min}}$ e $d = y_{\text{máx}}$.

6.2.1 Espalhamento Isotrópico em uma Placa Quadrada com 100 cm de Lado

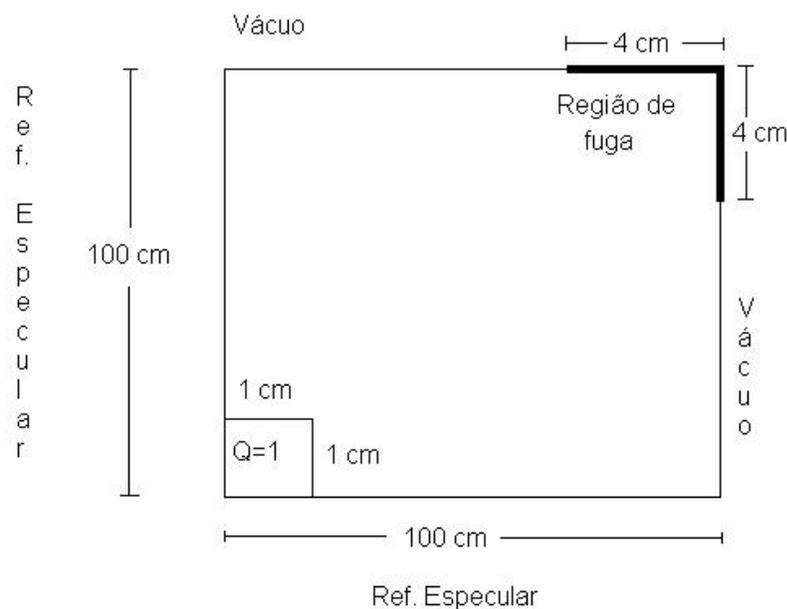


Figura 6.1: *Espalhamento isotrópico em uma placa 100 x 100 cm.*

Nesta seção é descrito o problema de estimação da corrente parcial de nêutrons considerando espalhamento isotrópico. Os valores dos limites de integração para o problema são $x_{\text{mim}} = y_{\text{min}} = 96$ cm e $x_{\text{máx}} = y_{\text{máx}} = 100$ cm.

Os valores de J sobre a região de fuga indicada na figura (6.1) são comparados com os resultados obtidos a partir do método de Lie e do método DAC (LTS_N-Dependência Angular Contínua) [40].

O método DAC é um método iterativo de solução, no qual para cada iteração é construída uma solução analítica para o fluxo angular com dependência contínua usando métodos da função de Green e formulação LTS_N nodal.

No primeiro caso, $\sigma_s = 0,99 \text{ cm}^{-1}$ e no segundo, $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$. Em ambos os casos, a seção de choque total σ_t é igual a 1 cm^{-1} .

Os valores obtidos para a corrente angular através da técnica da derivada fracionária são apresentados nas tabelas (6.3) e (6.4).

Método	J(nêutrons/cm ²)
DAC com ordem de quadratura 2	9.4×10^{-14}
DAC com ordem de quadratura 4	8.8×10^{-14}
LIE com ordem de quadratura 2	1.0×10^{-13}
Derivada Fracionária	1.2×10^{-13}

Tabela 6.3: *Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,99 \text{ cm}^{-1}$.*

Método	J(nêutrons/cm ²)
DAC com ordem de quadratura 2	1.3×10^{-22}
DAC com ordem de quadratura 4	3.7×10^{-22}
LIE com ordem de quadratura 2	4.5×10^{-22}
Derivada Fracionária	3.0×10^{-22}

Tabela 6.4: *Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$.*

Em ambos os casos a aproximação da função generalizada Delta de Dirac utilizada é dada por (6.21).

Os resultados obtidos para as correntes angulares, utilizando-se a técnica da derivada fracionária, apresentam uma boa concordância com os valores calculados através dos métodos DAC com ordens de quadraturas 2 e 4 e do método de LIE com ordem de quadratura 2, pois apresentam a mesma ordem de grandeza.

6.3 Cálculo dos Fluxos Angular e Escalar em Três Dimensões

Nesta seção, a metodologia de cálculo proposta nesse trabalho, que emprega a técnica de derivada fracionária, é aplicada à equação de transporte em três dimensões com o núcleo de Rutherford. A partir disso, obtemos o fluxo angular que é dado pela seguinte equação,

$$\psi(x, y, z, \mu, \varphi) = \frac{x^{-kq}}{\Gamma(-kq)} \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{x^j}{j!(j-kq)} \frac{\partial^j \psi_0}{\partial x^j}. \quad (6.17)$$

Para ilustrar o uso dessa metodologia, considerou-se um feixe de elétrons incidindo em um meio material formado por átomos de hidrogênio, com os seguintes parâmetros: $\sigma_t = 0,01 \text{ m}^{-1}$, $v = 10^4 \text{ m/s}$, $m = 9,11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$, $\varphi = 45$, $\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $Z = 1$. Os resultados obtidos para o fluxo angular, em função das coordenadas espaciais (x, y) são apresentados na figura (6.2).

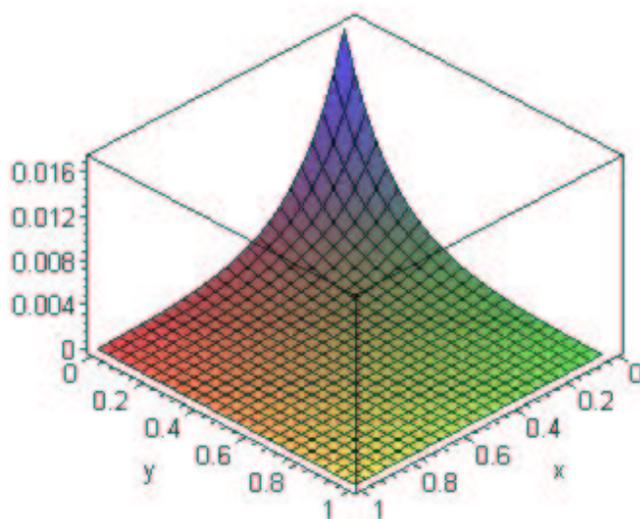


Figura 6.2: Simulação do fluxo angular como uma função da posição em $z=1$.

A partir do cálculo do fluxo angular $\psi(x, y, z, \mu, \varphi)$, que depende das direções μ e φ , determinamos o fluxo escalar $\psi(x, y, z)$, que independe dessas direções, através da seguinte equação,

$$\psi(x, y, z) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi(x, y, z, \mu, \varphi) \sin(\theta) d\theta d\varphi \quad (6.18)$$

onde,

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

A integral representada em (6.18) foi calculada usando-se a Regra de Simpson. Foi usada ordem de quadratura igual a 20.

Os resultados obtidos são apresentados na tabela (6.5).

x	y	z	$\psi(x, y, z)$
1	1	1	.4015307534e-05
2	1	1	.1511125366e-07
1	2	1	.1558245894e-07
1	1	3	.6025753909e-10
2	1	3	.2323525752e-12
4	4	3	.2011038734e-24
1	1	5	.9008289104e-15
3	1	5	.1340987196e-19
4	4	5	.3006978919e-29

Tabela 6.5: *Fluxo Escalar.*

Cumpramos ressaltar, que para o problema descrito, não existem resultados disponíveis na literatura. Independente disso, cabem, aqui, algumas observações importantes.

Para a obtenção desses resultados, assim como os obtidos para os problemas mencionados anteriormente, é relevante levar em consideração as diferentes aproximações utilizadas para a função generalizada Delta de Dirac. Para a aproximação utilizada neste trabalho (6.21), considerando a aproximação no truncamento

do somatório para a regra de derivada fracionária do produto de funções que leva à solução para o fluxo angular, a precisão prescrita é alcançada com no máximo 5 termos. Além disso, o valor de ϵ escolhido, que aparece na definição da função generalizada Delta de Dirac, varia de tal maneira a alcançar a coincidência de três dígitos significativos na solução. De fato, adotamos $\epsilon = 0.18$.

6.4 Cálculo de Dose Absorvida

6.4.1 Introdução à Dosimetria

O termo dose tem sido usado em muitos sentidos, isto reflete o fato que existem diversos tipos diferentes de medidas que têm sido úteis no estudo e controle dos efeitos da radiação ionizante na matéria. Os principais tipos dessas medidas são [41]:

- (1) Medida de dose absorvida na matéria no ponto de interesse.
- (2) Medida da energia liberada por partículas ionizantes indiretas (isto é, fótons e nêutrons) por unidade de massa de algum material de referência no ponto de interesse. O material de referência pode ser tanto o material atual presente no ponto de interesse, ou algum outro material: por exemplo, ar, grafite e tecido têm sido usados.
- (3) Medida do número de partículas e quanta, ou suas energias, incidente num dado ponto.
- (4) Medida de alguma função do número e energia de partículas e quanta incidentes num dado ponto. Por exemplo, a função pode ser escolhida como o produto da dose absorvida pelo fator de qualidade para radiações de diferentes LET (Linear Energy Transfer).

Esse termo é tão importante no campo de Física Nuclear, que dele originou um novo ramo da ciência nuclear, com características próprias, ou seja, a Dosimetria das Radiações, a qual é aplicada, geralmente, a todos esses tipos de medidas.

6.4.2 Noções Fundamentais

Nesta subseção, definimos alguns conceitos importantes usados na dosimetria das radiações e necessários para a discussão de efeitos biológicos de radiação.

6.4.2.1 Radiação Ionizante

É usualmente definida como aquela que pode ionizar a matéria tanto diretamente como através da ação de radiação secundária. O processo de ionização ocorre quando energia suficiente é transferida para um material para retirar elétrons dos átomos ou moléculas.

6.4.2.2 Dose Absorvida

A dose absorvida (D) de qualquer radiação ionizante, em qualquer meio material, é definida como a quantidade de energia cedida á matéria pelas partículas ionizantes por unidade de massa, e é dada por,

$$D = \frac{d\bar{\epsilon}}{dm}, \quad (6.19)$$

onde $d\bar{\epsilon}$ é a energia concedida pela radiação ionizante a matéria em um elemento de volume e dm é a massa da matéria no volume de elemento considerado. Podemos ainda dizer, que dose absorvida é a quantidade de energia em Joules transferida a cada quilograma de tecido biológico, e ela aparece como excitação ou ionização das moléculas ou átomos do tecido.

No sistema internacional, a unidade é o Gray (Gy). A relação entre elas é,

$$1 \text{ Gy} = 1 \text{ J.kg}^{-1} = 100 \text{ rads},$$

onde rad é a unidade antiga e,

$$1 \text{ rad} = 100 \text{ ergs/g.}$$

Neste capítulo, calculamos a taxa de dose absorvida, obtida em função do fluxo escalar, dado pela seguinte expressão,

$$\psi(x, \lambda) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu, \lambda) d\mu. \quad (6.20)$$

O fluxo escalar, como já foi citado anteriormente, é obtido a partir do cálculo do fluxo angular usando-se a formulação do método da derivada fracionária.

No modelo da equação de transporte multigrupo de energia, como o fluxo angular apresenta dependência discreta com a energia, a taxa de dose absorvida é escrita como,

$$D_T = \sum_{i=0}^M \mu_{a_i} E_i \psi(x, \lambda_i), \quad (6.21)$$

onde μ_{a_i} é o coeficiente de absorção do meio material em cm^2/g para a energia $E_i(\text{Mev})$, com,

$$\mu_{a_i} \equiv \mu_a(\lambda_i), \quad (6.22)$$

$$E_i = \frac{0,511}{\lambda_i}, \quad (6.23)$$

Por outro lado, quando o fluxo angular apresenta dependência contínua com a energia, a taxa de dose absorvida numa certa região irradiada é descrita por,

$$D_T(x) = \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \mu_a E \psi(x, \lambda) d\lambda, \quad (6.24)$$

Nesta altura, cumpre observar que, como estamos aplicando o método da derivada fracionária, e considerando a dependência contínua do fluxo angular com a energia, neste trabalho, a taxa de dose absorvida será calculada pela equação (6.24).

6.4.2.3 Taxa de Dose Absorvida

A taxa de dose absorvida é dada por,

$$D = \frac{dD}{dt}, \quad (6.25)$$

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

A unidade da taxa de dose absorvida é qualquer quociente de rad ou seus múltiplos ou submúltiplos divididos por uma apropriada unidade de tempo (rads/s, mrads/h, etc.).

6.4.2.4 Dose Equivalente

O efeito biológico da deposição de energia pode ser maior ou menor, dependendo do tipo de radiação que a provocou. Por exemplo, uma dose devido a nêutrons rápidos ou partículas alfa é muito mais danosa que uma dose devido a raios X ou raios gamma.

A dose de absorção D é insuficiente, por si só, para estabelecer se a severidade ou a probabilidade de um efeito nocivo à saúde resulta de uma irradiação sob condição não específica. Por estas razões, foi introduzido uma outra quantidade que se relaciona de maneira mais eficiente com os mais importantes efeitos nocivos à saúde da exposição às radiações e, particularmente, com os efeitos que só se manifestarão em gerações futuras. Essa quantidade, denomina-se dose equivalente (H_{eq}), a qual é obtida multiplicando-se a dose absorvida pelos fatores modificadores apro-

priados, obtidos em tabelas publicadas na literatura.

Dessa forma, a dose equivalente é dada por,

$$H_{eq} = D \cdot QF \cdot QF_1 \cdot QF_2 \cdot \dots, \quad (6.26)$$

onde,

D é a dose absorvida,

QF é o fator de qualidade e

$QF_1 \cdot QF_2 \cdot \dots$ fatores de distribuição.

A unidade da dose equivalente é rems se D for expresso em rads e é Sievert (Sv) se D for expresso em Gy, onde,

$$1 \text{ Sv} = 1 \text{ J.kg}^{-1} = 100 \text{ rems.}$$

6.5 Cálculo de Dose

Os isótopos radioativos ou radioisótopos, devido à sua propriedade de emitirem radiações, a cada dia, vêm sendo mais empregados nos múltiplos campos de atividade humana. Quer na agricultura, quer na pecuária, na biologia e principalmente na medicina, eles têm auxiliado na incessante procura de melhores condições de vida.

As radiações, emitidas pelos radioisótopos, podem atravessar a matéria ou serem absorvidas por ela, o que possibilita diversas aplicações. Mesmo em quantidades cuja massa não pode ser determinada pelos métodos químicos, a radiação por eles emitida pode ser detectada. Pela absorção da energia das radiações, células ou pequenos organismos, podem ser destruídos. Essa propriedade, que normalmente é altamente inconveniente para os seres vivos, pode ser usada em seu benefício, quando empregada para destruir células ou microorganismos nocivos.

Os radioisótopos são utilizados, na área da medicina nuclear, tanto em

diagnósticos como em terapias. Hoje, uma das mais importantes aplicações desses radioisótopos é a radioterapia.

A radioterapia teve origem na aplicação do elemento rádio pelo casal Curie, para destruir células cancerosas, e foi inicialmente conhecida como “Curieterapia”. Posteriormente, outros radioisótopos passaram a ser usados, apresentando um maior rendimento.

A radioterapia tem como objetivos: (a) aplicar, na região do tumor, uma quantidade de dose suficiente para controlá-lo e (b) minimizar o risco de complicações nos tecidos sãos. Assim, a radioterapia procura maximizar a probabilidade de controle local do tumor sem produzir complicações nos tecidos sãos que estão próximos à região irradiada. Sendo assim, a determinação precisa da dose depositada em uma região irradiada é essencial para o bom resultado do tratamento radioterapêutico. Métodos analíticos são utilizados para o cálculo dessa quantidade de dose, porém eles podem apresentar certos problemas, tais como consumir um tempo excessivo de processamento, ou ainda, apresentarem um alto índice de erro no cálculo da dose. Esses fatos levaram a comunidade científica a empreender um grande esforço no sentido de reduzir o erro dos métodos analíticos empregados e torná-los mais rápidos.

Uma das principais causas que geram erros nas formulações analíticas são as aproximações feitas na equação que descreve o transporte de partículas. Na metodologia apresentada neste trabalho, não se utiliza nenhuma das aproximações tradicionalmente empregadas para a solução da equação de transporte de partículas. A técnica da derivada fracionária foi aplicada na equação de transporte de partículas carregadas e obtivemos o fluxo angular ψ . A partir do fluxo angular, obtivemos o fluxo escalar e, desta forma, podemos determinar perfeitamente a quantidade de dose absorvida em uma certa região irradiada.

Usando a formulação descrita na seção (5.3.2.3), onde uma expressão para a taxa de dose absorvida foi obtida em função do fluxo angular e do coeficiente de absorção do meio material, apresentamos os valores dessa quantidade para uma camada de água de 20 cm e outra de 100 cm de espessura considerando feixes de

fótons com energias iniciais de 2 Mev e 1.25 Mev, respectivamente. Os resultados obtidos são apresentados nas tabelas (6.6) e (6.7).

Método	$x(\text{cm})$	$E(\text{Mev})$	Taxa de Dose(mrad/h)
$LTS_N, N=2$	20	2	1.8300e-04
Derivada Fracionária	20	2	3.3621e-04

Tabela 6.6: *Taxa de Dose Absorvida para uma camada de água de 20 cm de espessura.*

Método	$x(\text{cm})$	$E(\text{Mev})$	Taxa de Dose(mrad/h)
$LTS_N, N=2$	100	1.25	1.4400e-05
Derivada Fracionária	100	1.25	1.2763e-05

Tabela 6.7: *Taxa de Dose Absorvida para uma camada de água de 100 cm de espessura.*

Comparando os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida, através do emprego da técnica da derivada fracionária, com os apresentados pelo método LTS_N , verificamos que eles apresentam uma concordância significativa, tanto para a camada de água de 20 cm como para a de 100 cm de espessura. Cumpre observar que, para espessuras maiores, os resultados tendem a melhorar, pois se aproximam do que pode ser considerado um meio infinito.

Para todos os problemas expostos neste trabalho foram testadas as outras representações da função Delta de Dirac, não apresentando bons resultados. Isto deve-se ao fato, de que para obtermos a solução da equação de transporte, trabalhamos com as derivadas da função generalizada Delta de Dirac, que variam muito de uma aproximação para outra e influenciam diretamente nos resultados obtidos.

Cumpre ainda observar, que a formulação proposta neste trabalho foi aplicada a problemas em meios infinitos e os resultados obtidos foram comparados com os de outros métodos aplicados a meios finitos, isso porque não existem resultados, para meios infinitos, disponíveis na literatura. Desta forma, os resultados numéricos não podem ser conclusivos, mas indicam que estamos no caminho certo, já que nossa principal preocupação foi desenvolver um método que resolvesse tanto problemas unidimensionais como multidimensionais.

Estudamos, ainda, uma maneira de construirmos uma solução para problemas em meio finito. Para tal, considere a equação de transporte unidimensional dada por (3.1), por exemplo.

Quando estamos trabalhando em meio infinito, não trabalhamos com condições de contorno, diferentemente do que ocorre no meio finito. Sendo assim, para aplicarmos a técnica da derivada fracionária a problemas em meio finito, seguimos a idéia do método das imagens, no qual obtemos termos de fonte, S_1 e S_2 , equivalentes às condições de contorno em $x=0$ e $x=L$, respectivamente, dados por,

$$S_1 = f(\mu)\delta(x)(H(\mu - 1) - H(\mu)) \quad (6.27)$$

e,

$$S_2 = g(\mu)\delta(x - L)(H(\mu) - H(\mu + 1)), \quad (6.28)$$

onde H representa a função de Heaviside dada por (6.14),

$$f(\mu) = f_m, \quad \mu > 0$$

e,

$$g(\mu) = g_m, \quad \mu < 0.$$

Aqui, f_m e g_m representam o fluxo incidente nas fronteiras do domínio.

Sendo assim, a solução da equação de transporte, por derivada fracionária, em meio finito, será da seguinte forma,

$$\psi = \psi_h + \psi_h * S_1, \quad \mu > 0, \quad (6.29)$$

$$\psi = \psi_h + \psi_h * S_2, \quad \mu < 0, \quad (6.30)$$

onde $*$ denota convolução.

Cabe observar, que a solução homogênea ψ_h é obtida através da aplicação do método da derivada fracionária na solução da equação de transporte em meio infinito, solução apresentada neste trabalho.

Deste modo, esperamos que a técnica da derivada fracionária possa ser aplicada em problemas de transporte em domínio limitado.

7 CONCLUSÃO

Este trabalho teve por objetivo o emprego do método da derivada fracionária na equação de transporte para a determinação dos fluxos angular e escalar, considerando um feixe de fótons em meios materiais, da corrente parcial de nêutrons para problemas bidimensionais em meios homogêneos, do fluxo angular para a equação de transporte tridimensional e para o cálculo da taxa de dose absorvida em uma região irradiada.

Foram, ainda, apresentadas simulações numéricas para problemas em meio infinito e uma generalização teórica aplicada a problemas em domínio limitado.

Os resultados obtidos mostram que o objetivo foi alcançado no sentido de que foi possível encontrar uma solução pelo método proposto, tanto para problemas unidimensionais como multidimensionais em geometria cartesiana, observando que a diferença básica entre estas soluções aparece no número de integrais que aparece na solução. Cabe ainda observar, que o esforço computacional necessário para a resolução dos problemas é relativamente pequeno.

A idéia básica deste método consiste no uso da definição integral para derivada fracionária, que é usada para determinar a ordem q dessa derivada e, da regra de derivada fracionária do produto de funções, que nos permite estabelecer uma solução para o fluxo angular. O uso da representação integral nos permite encontrar uma solução para o fluxo angular somente nos casos especiais onde a integral pode ser analiticamente calculada, enquanto que a solução por derivada fracionária, neste sentido, é totalmente geral.

Finalmente, é importante salientar que a formulação proposta nesse trabalho pode ser generalizada, sem dificuldade, na construção da solução da equação de transporte multidimensional com espalhamento anisotrópico, fontes arbitrárias, ou ainda, com seção de choque variando com a posição. Acreditamos que o método da derivada fracionária é um método promissor para resolver problemas de trans-

porte e, em trabalhos futuros, realizaremos simulações numéricas da generalização teórica da metodologia para domínios limitados.

Bibliografia

- [1] Alastair, I.M.R., *Quantum Physics Illusion or Reality*, Cambridge University Press, 1994.
- [2] Barichello, L.B., *Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenadas Discretas Unidimensional*, Tese de Doutorado no Programa de Engenharia Mecânica da UFRGS, PROMEC UFRGS, Porto Alegre, 1992.
- [3] Barichello, L.B., Vilhena, M.T., *A General Approach to One Group Dimensional Transport Equation*, Kerntechnik, v.58, p.182, 1993.
- [4] Barros, R.C., Larsen, E.W., *A Numerical Method for One Group Slab-Geometry Discrete Ordinates Problems with no Spatial Truncation Error*, Nuclear Science and Engineering, v.104, p.199-208, 1991.
- [5] Vilhena, M.T., Streck, E.E., *An Aproximated Analytical Solution Of the One Group Neutron Transport Equation*, Kerntechnik, v.57, p.196, 1992.
- [6] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *Analytical Solution for the A_N Approximation*, Progress and Nuclear Energy, v.31, p.219, 1997.
- [7] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *Solução Analítica da Aproximação A_N da Equação de Transporte Linear com Simetria Planar*, Anais do X Encontro Nacional de Física dos Reatores e Termo-Hidráulica (X ENFIR), Águas de Lindóia, São Paulo, p.528, 1995.
- [8] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *A Solution of Linear Transport Equation Using Walsh Function and Laplace Transform*, Annals of Nuclear Energy, v.21, p.495, 1994.
- [9] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *As Funções de Walsh e sua Aplicação na Solução da Equação de Transporte de Nêutrons*, Anais do IX Encontro Nacional de Física dos Reatores e Termo-Hidráulica (IX ENFIR), p.37-41, Caxambu, 1993.

- [10] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *Solução da Equação de Transporte Linear Utilizando Polinômio de Chebyshev e Transformada de Laplace*, Anais do V Congresso Geral de Energia Nuclear (V CGEN), v.I, p.157, Rio de Janeiro, 1994.
- [11] Cardona, A.V., Vilhena, M.T., *A Solution of Linear Transport Equation Using Chebyshev Polynomial and Laplace Transform*, Kerntechnik, v.59, p.278, 1994.
- [12] Cardona, A.V., Segatto, C.F., Vilhena, M.T., *Solução da Equação Bidimensional de Transporte pelo Método $LTCh_N$* , Anais do VI Congresso Nacional de Energia Nuclear (VI CEGEN), Rio de Janeiro, 1996.
- [13] Deveaux, C., Siewert, C.E., *The F_N Method for Radiative Transfer Problems without Azimuthal Symmetry*, Z. Angew, Math. Phys., v.31, 592, 1980.
- [14] Garcia, R.D.M., *A Review of the F_N Method in Particle Transport Theory*, Transp. Theory and Stat. Phys. v.14, 391, 1985.
- [15] Siewert, C.E., Dunn, W.L., *Radiation Transport in Plane-Parallel Media with Non-Uniform Surface Illumination*, Z. Angew, Math. Phys., v.34, 627, 1985.
- [16] Siewert, C.E., Dunn, W.L., *The Searchlight Problem in Radiative Transfer*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, v.41, 467, 1989.
- [17] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Segatto, C.F., Pazos, R.P., *Determination of a Closed-Form Solution for the Multidimensional Transport Equation Using Fractional Derivative*, Annals of Nuclear Energy, v.29,p.1141-1150, Inglaterra, 2002.
- [18] Batistela, C.H.F., *Estudo de Criticalidade pelo Método LTS_N* , Tese de Doutorado no Programa de Engenharia Mecânica da UFRGS, PROMEC UFRGS, Porto Alegre, 1997.

- [19] Batistela, C.H.F., Vilhena, M.T., *Criticality Calculation by the LTS_N Method*, Journal of Nuclear Science and Technology, v.34, o.603-606, 1997.
- [20] Batistela, C.H.F., Vilhena, M.T., Borges, V., *Cálculo do Fator de Multiplicação Efetivo pelo Método LTS_N* , EGATEA/UFRGS, v.24, p.101-111, 1996. Journal of Nuclear Science and Technology, v.34, o.603-606, 1997.
- [21] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Barichello, L.B., *Analytical Solution of the 3-D Discrete Ordinates Equation by the LTS_N Method*, Annals of Nuclear Energy, v.22, p.131-134, 1995.
- [22] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Barichello, L.B., *An Analytical Solution for the Two Dimensional Discrete Ordinates Problem in a Convex Domain*, Progress in Nuclear Energy, v.31, p.225-228, 1997.
- [23] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Segatto, C.F., Pazos, R.P., *Determination of a Closed-Form Solution for the Multidimensional Transport Equation Using Fractional Derivative*, Annals of Nuclear Energy, in press.
- [24] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Segatto, C.F., Pazos, R.P., *Determination of a Closed-Form Solution for the Multidimensional Transport Equation Using Fractional Derivative*, 17th International Conference on Transport Theory, p.213, London, 2001.
- [25] Amaral, B.D., Vilhena, M.T., Borges, V., *Solução da Equação de Transporte em Três Dimensões com o Núcleo de Rutherford Usando Derivada Fracionária*, Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo-Hidráulica (ENFIR), Rio de Janeiro, 2002.
- [26] Wood, J., *Computational Methods in Reactor Shielding*, Pergamon Press. Oxford. England, 1982.
- [27] Oldham, K., Spanier, J., *The Fractional Calculus*, Academic Press, New York, 1974.

- [28] Churchill, R.V., *Variáveis Complexas e suas Aplicações*, McGraw-Hill, 1975.
- [29] Azambuja, H.F., *A Função Delta, Propriedades e Aplicações*, Editora Meridional Emma, Porto Alegre, 1964.
- [30] Miller, K.S., Ross, B., *An Introduction to the Fractional calculus and Fractional Differential Equations*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1993.
- [31] Zabadal, J.R., Vilhena, M.T., Livotto, P., *Simulation of Chemical Reactions Using Fractional Derivatives*, Il Nuovo Cimento, 116-B (3), in press, 2001.
- [32] Zabadal, J.R., Secchi, A., *Sistemas de Simulação para Processos Transientes*, Proceedings of 12th Brazilian Congress of chemical Engineering, Brazil, 1996.
- [33] Lacroix, S.F., *Traité du calcul différentiel et du calcul integral*, Courcier, Paris, p.409-410, 1819.
- [34] Abel, N.H., *Solution de quelques problèmes à l'aide d'intégrales définies*, Oeuvres Complètes, v.1, p.16-18, Norway, 1823.
- [35] Sonin, N. Ya., *On the Differentiation with Arbitrary Index*, Moscow Mat., p.1-38, 1869.
- [36] Börges, C., Larsen, E.W., *On the Accuracy of the Fokker-Planck and Fermi Pencil Beam Equations for Charged Particle Transport*, Medical Physics, v.23, p.1749-1759, 1996.
- [37] Trindade, L.B., *Cálculo da Dose pelo Método LTP_N Aplicado à Equação de Boltzmann Unidimensional para Fótons em Valores Discretos de Energia*, Dissertação de Mestrado no Programa de Engenharia Mecânica da UFRGS, PROMEC UFRGS, Porto Alegre, 1997.

- [38] Sauer, L.Z., *Solução da Equação de Transporte Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina: Uma Aplicação ao Cálculo de Dose*, Dissertação de Mestrado no Programa de Matemática Aplicada da UFGRS, PPGMA_p UFGRS, Porto Alegre, 1997.
- [39] Lunelli, R., *Solução da Equação de Transporte de Fótons para uma Placa Heterogênea, Modelo de Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina*, Dissertação de Mestrado no Programa de Matemática Aplicada da UFGRS, PPGMA_p UFGRS, Porto Alegre, 2002.
- [40] Gehlen, R.Z.C., *Método Iterativo para Solução da Equação de Transporte Multidimensional em Geometria Cartesiana*, Dissertação de Mestrado no Programa de Engenharia Mecânica da UFGRS, PROMEC UFGRS, Porto Alegre, 2000.
- [41] Attix, F.H., Roesch, W.C., *Radiation Dosimetry*, Academic Press, New York, 1968.
- [42] Johns, H.E. & Cunningham, J.R., *The Physics of Radiology*, Charles C. Thomas Publisher, Illinois, 1983.
- [43] Bell, G.I., Glasstone, S., *Nuclear Reactor Theory*, Robert E. Krieger Publishing Company. Huntington, New York, 1979.

APÊNDICE A DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE - FORMA GENÉRICA

O principal objetivo da Teoria de Transporte é determinar a distribuição de partículas num meio, levando em conta o movimento das mesmas e sua interação com este meio. Uma vez que não podemos especificar o número exato de partículas, numa certa região, num dado tempo, devido a natureza aleatória dos eventos de interação, trabalhamos, então, com a equação de transporte, que é a descrição matemática desse movimento de partículas através dos meios materiais, que envolve uma aproximação estatística, baseada em algumas considerações:

- as interações entre partículas são negligenciadas, o que se traduz na linearidade da equação;
- as colisões são consideradas instatâneas;
- entre as colisões, as partículas movem-se em linha reta e com velocidade constante;
- as partículas são consideradas pontuais;
- somente o valor “esperado” de partículas, é considerado;
- as propriedades do material são consideradas isotrópicas.

A derivação da equação de transporte é válida tanto para nêutrons como para fótons e será deduzida com a notação usada na física de reatores, para tanto serão definidas certas quantidades, necessárias à descrição do problema de transporte de nêutrons.

A.1 Definições e Notações

A.1.1 Nêutron como uma Partícula Pontual

Na Teoria de Transporte, um nêutron é considerado como uma partícula pontual no sentido de que pode ser descrito completamente por sua posição \underline{r} e velocidade \underline{v} . O vetor velocidade é freqüentemente representado por,

$$\underline{v} = v\underline{\Omega} \quad (\text{A.1})$$

onde $v(= |\underline{v}|)$ é a grandeza escalar da velocidade e $\underline{\Omega}$ é um vetor unitário na mesma direção de \underline{v} .

A.1.2 Densidade Angular de Nêutrons

É o número provável (ou esperado) de nêutrons na posição \underline{r} , com direção $\underline{\Omega}$ e energia E no instante t , por unidade de volume, por unidade de ângulo sólido, por unidade de energia. Assim $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)dVd\underline{\Omega}dE$ é o número esperado de nêutrons no elemento de volume dV em \underline{r} , tendo direções dentro do ângulo sólido $d\underline{\Omega}$ em torno de $\underline{\Omega}$ e energia no intervalo dE em E , no tempo t .

A.1.3 Densidade de Nêutrons

A integral da densidade angular de nêutrons sobre todas as direções (ou todos os ângulos sólidos) é igual a densidade de nêutrons $n(\underline{r}, E, t)$, assim,

$$\text{Densidade de Nêutrons} = \int_{4\pi} N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)d\underline{\Omega} \equiv n(\underline{r}, E, t) \quad (\text{A.2})$$

onde o símbolo 4π representa a integração em todas as direções. Conseqüentemente, a quantidade $n(\underline{r}, E, t)$ representa o número esperado de nêutrons em \underline{r} com energia E , no tempo t , por unidade de volume, por unidade de energia.

A.1.4 Corrente Angular de Nêutrons

A corrente angular de nêutrons é definida como o produto do vetor velocidade pela densidade angular de nêutrons,

$$j(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \equiv vN(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \quad (\text{A.3})$$

A.1.5 Fluxo Angular de Nêutrons

É definido como produto do módulo da velocidade pela densidade angular de nêutrons,

$$\psi(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \equiv vN(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \quad (\text{A.4})$$

A.1.6 Fluxo Escalar de Nêutrons

A integral do fluxo angular sob todas as direções é chamada de fluxo escalar de nêutrons, isto é,

$$\phi(\underline{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\underline{\Omega} = \int_{4\pi} vN(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\underline{\Omega} = vn(\underline{r}, E, t) \quad (\text{A.5})$$

O fluxo escalar de nêutrons é o produto do módulo da velocidade pela densidade de nêutrons.

A.1.7 Corrente de Nêutrons

Define-se a corrente de nêutrons como a integral da corrente angular sob todas as direções,

$$J(\underline{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} j(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\underline{\Omega} \quad (\text{A.6})$$

A.1.8 Fontes Independentes

As fontes independentes são fontes de nêutrons que não dependem da densidade de nêutrons do sistema. Elas aparecem por outras razões que não colisões de nêutrons, isto é, não aparecem de fissões e reações de nêutrons similares. Elas aparecem, por exemplo, de processos de fissões espontâneas ou, ainda, pela ação de partículas de raios cósmicos e são representadas pela quantidade $Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$, que é definida como a probabilidade, por unidade de tempo, que um nêutron de energia E apareça em \underline{r} por unidade de ângulo sólido, por unidade de energia, isto é, $QdVd\underline{\Omega}dE$ é razão esperada de que cada nêutron apareça em um volume dV com direção em $d\underline{\Omega}$ e energia em dE .

A.1.9 Seções de Choque

A quantidade $\sigma_t(\underline{r}, E)$, denominada seção de choque macroscópica total, é definida como a probabilidade de reação de um nêutron por unidade de comprimento de trajetória.

A seção de choque macroscópica total é a soma das seções de choque parciais para todos os possíveis tipos de colisões nêutron-núcleo. As seções de choque parciais representam geralmente a probabilidade de que um tipo particular de partícula emerja da colisão. Então definimos:

- $\sigma_e(\underline{r}, E)$ seção de choque de espalhamento elástico
- $\sigma_i(\underline{r}, E)$ seção de choque de espalhamento inelástico
- $\sigma_\gamma(\underline{r}, E)$ seção de choque de captura radioativa
- $\sigma_f(\underline{r}, E)$ seção de choque de fissão.

Define-se seção de choque diferencial como a probabilidade de que, havendo colisões tais como, espalhamento, fissões, os nêutrons resultantes dessas determinadas colisões tenham várias direções e energias. A seção de choque diferencial pode ser representada por,

$$\sigma_x(\underline{r}, E') f_x(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) \quad (\text{A.7})$$

onde σ_x é a seção de choque para uma reação do tipo x para nêutrons de energia E' e $f_x(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) d\underline{\Omega} dE$ é a probabilidade que um nêutron de direção $\underline{\Omega}'$ e energia E' tenha uma colisão do tipo x , emergindo da colisão um nêutron no intervalo $d\underline{\Omega}$ em torno de $\underline{\Omega}$ com energia dE em E . Para as colisões com espalhamento elástico ou inelástico, um nêutron emerge para cada nêutron que colide com o núcleo. A probabilidade pode, conseqüentemente ser normalizada para a unidade. Então, para o espalhamento elástico, a integração sobre todas as direções e energias resulta,

$$\int \int f_e(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) d\underline{\Omega} dE = 1 \quad (\text{A.8})$$

e uma expressão similar é aplicada para o espalhamento inelástico. Para a captura radioativa e outras reações nas quais nenhum nêutron emerge, f é zero. Para a fissão, uma boa aproximação resulta ao assumirmos que os nêutrons são emitidos isotropicamente em sistema de laboratório. Assim, é possível escrever,

$$f_f(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) d\underline{\Omega} dE = \frac{1}{4\pi} \nu(\underline{r}, E' \rightarrow E) d\underline{\Omega} dE \quad (\text{A.9})$$

onde $\nu(\underline{r}, E' \rightarrow E) dE$ é o espectro de fissão dos nêutrons, ou seja, a probabilidade que uma fissão causada por um nêutron de posição \underline{r} e energia E' conduza a um nêutron dentro de dE sobre E . Além disso, $\nu(\underline{r}, E')$ é normalizado e, desta forma,

$$\frac{1}{4\pi} \int \int \nu(\underline{r}, E' \rightarrow E) d\underline{\Omega} dE = \int \nu(\underline{r}, E' \rightarrow E) dE = \underline{\nu}(\underline{r}, E') \quad (\text{A.10})$$

onde $\underline{\nu}(\underline{r}, E')$ é o número de nêutrons produzidos por uma fissão em \underline{r} causada por um nêutron de energia E' .

A.1.10 Taxas de Interação

A seção macroscópica de choque, σ_x , é a probabilidade de que um nêutron sofra uma reação particular, indicada por x , na unidade de distância. Se v é a velocidade do nêutron, então $v\sigma_x$ é a probabilidade correspondente por unidade de tempo. Por isso, se N é a densidade angular do nêutron, a taxa de interação, em unidades apropriadas é dada por $v\sigma_x N$. Integrando-se a taxa de interação em todas as direções,

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} v\sigma_x N d\Omega &= \int_{4\pi} v\sigma_x(\underline{r}, E) N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\underline{\Omega} = \\ &= v\sigma_x(\underline{r}, E) \int_{4\pi} N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\underline{\Omega} = v\sigma_x(\underline{r}, E) n(\underline{r}, E, t) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

onde $v\sigma_x(\underline{r}, E)n(\underline{r}, E, t)$ é o número de interações do tipo x por unidade de volume e de energia na posição \underline{r} e tempo t devido a nêutrons de energia E , na unidade de tempo.

O número de nêutrons por unidade de volume, tendo direções no interior de $d\underline{\Omega}'$ e energia dE' em E' é $N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t)d\underline{\Omega}'dE'$. A taxa de nêutrons por unidade de volume e de tempo, na posição \underline{r} e tempo t , na qual tais nêutrons são transferidos por interações do tipo x para direções finais $d\Omega$ em torno de $\underline{\Omega}$ e energias finais dE em E é ,então,

$$v'\sigma_x(\underline{r}, E')f_x(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E)N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t)d\underline{\Omega}'dE'd\Omega dE \quad (\text{A.12})$$

A.2 Derivação da Equação de Transporte de Nêutrons

Derivamos uma equação exata de fase-espaco-densidade $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$, que caracteriza o processo de transporte pelo simples balanceamento dos vários

mecanismos pelos quais as partículas podem ser ganhadas ou perdidas em um volume arbitrário dentro de um sistema,

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taxa de tempo} \\ \text{da troca de n} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Troca devido ao vazamento} \\ \text{através de S} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Troca devido} \\ \text{colisões} \end{array} \right] + \left[\text{Fontes} \right]$$

Consideremos o que acontece a um feixe de nêutrons, decorrido um intervalo de tempo Δt [43]. Os nêutrons de energia E que sofrem uma colisão podem ser considerados como perdidos do feixe, ao passo que os que não colidem, permanecem. A distância percorrida por um nêutron no tempo Δt é $v\Delta t$; então, a probabilidade do mesmo colidir neste tempo é,

$$\sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t \quad (\text{A.13})$$

A probabilidade de que um nêutron não sofra uma colisão neste tempo e que permaneça no feixe é, conseqüentemente,

$$1 - \sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t \quad (\text{A.14})$$

Segue, portanto, que o número de nêutros que permanecem no feixe é,

$$N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)[1 - \sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t]dV d\underline{\Omega}dE \quad (\text{A.15})$$

Estes, voltarão à posição $\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t$ no tempo $t + \Delta t$.

Além dos nêutros perdidos do feixe por colisões, alguns podem ingressar, como resultado de colisões com nêutrons estranhos ao feixe e de fontes independentes. Estas duas últimas quantidades, são dadas, respectivamente, como o número de nêutrons ingressantes no feixe como resultado de colisões,

$$\left[\int \int \sigma_t(\underline{r}, E')f(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \Omega, E)v'N(\underline{r}, \underline{\Omega}', e', t)d\underline{\Omega}'de' \right] dV d\underline{\Omega}dE\Delta t \quad (\text{A.16})$$

e o número de nêutrons que ingressam no feixe através de fontes,

$$Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) dV d\underline{\Omega} dE \Delta t \quad (\text{A.17})$$

Adicionando (A.15), (A.16) e (A.17) e eliminado $dV d\underline{\Omega} dE$, a densidade angular de nêutrons na posição $\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t$ no tempo $t + \Delta t$ é dada por,

$$\begin{aligned} N(\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t, \underline{\Omega}, E, t + \delta t) &= N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)(1 - \sigma_t v \Delta t) + \\ &+ \left[\int \int \sigma'_t f v' N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t) d\underline{\Omega}' dE' \right] \Delta t + Q \Delta t \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

onde, para simplificar a representação, usamos,

$$\sigma_t \equiv \sigma_t(\underline{r}, E),$$

$$\sigma'_t f \equiv \sigma_t(\underline{r}, E') f(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega})$$

e

$$Q \equiv Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, e, t).$$

A seguir, dividindo ambos os membros da expressão (A.18) por Δt e fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, o resultado após simplificações, é,

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)}{\Delta t} \right] + \sigma_t v N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) &= \\ = \int \int \sigma'_t f v' N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t) d\underline{\Omega}' dE' + Q \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

O primeiro termo da equação (A.18) é a derivada total da densidade angular de nêutrons em função do tempo, e é denotado por $\frac{dN}{dt}$, onde N representa $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$.

Se o termo $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t)$ for adicionado e subtraído ao numerador do termo entre colchetes, na equação (A.18), são obtidas duas expressões que podem ser facilmente calculadas, quais sejam,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)}{\Delta t} \right] = \frac{\partial N}{\partial t} \quad (\text{A.20})$$

e,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t)}{\Delta t} \right] = v\underline{\Omega} \cdot \nabla N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \quad (\text{A.21})$$

O resultado (A.21) pode ser facilmente obtido em coordenadas cartesianas, onde \underline{r} e $\underline{\Omega}$ tem componentes x, y, z e $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$, respectivamente. O lado esquerdo da equação (A.21) pode se escrito como,

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(x + \Omega_x v \Delta t, y + \Omega_y v \Delta t, z + \Omega_z v \Delta t, \dots) - N(x, y, z, \dots)}{\Delta t} \right] = \\ = v\Omega_x \frac{\partial N}{\partial x} + v\Omega_y \frac{\partial N}{\partial y} + v\Omega_z \frac{\partial N}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Esta expressão representa v vezes a derivada direcional de N na direção $\underline{\Omega}$ e pode, conseqüentemente, ser representada por $v\underline{\Omega} \cdot \nabla N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$ como na equação (A.21).

Substituindo as equações (A.19), (A.20) e (A.21) em (A.18), o resultado é,

$$\frac{\partial N}{\partial t} + v\underline{\Omega} \cdot \nabla N + \sigma_t v N = \int \int \sigma'_t f v' N' d\underline{\Omega}' dE' + Q \quad (\text{A.23})$$

onde,

$$N \equiv N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$$

e,

$$N' \equiv N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E, t).$$

A equação (A.23) é a forma básica da equação de transporte de nêutrons. Quanto ao significado físico dos dois primeiros termos do lado esquerdo dessa equação, podemos dizer que juntos são iguais ao primeiro termo da equação (A.19). A quantidade $\frac{\partial N}{\partial t}$ é a variação do tempo de mudança da densidade angular de nêutrons, na posição fixa \underline{r} ; esta, difere de $\frac{dN}{dt}$, a razão de mudança no feixe em movimento, com velocidade de nêutron $V = v\underline{\Omega}$.

A diferença, $-v\underline{\Omega} \cdot \nabla N$, representa a variação de mudança da densidade angular de nêutrons na posição \underline{r} , devido ao fluxo, isto é, o movimento dos mesmos em linha reta, sem nenhuma colisão. A variação na mudança calculada por um observador movendo-se com o feixe de nêutrons é $\frac{dN}{dt}$, sem contribuição do fluxo, ao passo que, quando determinada por um observador fixo em \underline{r} , o resultado é $\frac{\partial N}{\partial t}$, que considera a mudança devido ao fluxo de nêutrons. O termo $v\underline{\Omega} \cdot \nabla N$ é, conseqüentemente, algumas vezes, referido como termo fluxo, na equação de transporte de nêutrons.

Na verdade, este termo representa o efeito do fluxo, que poderia ser obtido por derivação da variação daquele fluxo de nêutrons, através de um pequeno elemento de volume. Se este elemento for limitado por planos, tendo coordenadas $x, x + \Delta x; y, y + \delta y$ e $z, z + \Delta z$, tais que o volume seja $dV = \Delta x \Delta y \Delta z$, o número de nêutrons do elemento de volume, que estão movendo-se na direção $\underline{\Omega}$ é, então, $N(x, y, z, \underline{\Omega}, E, t)dV$. A variação sob a qual os nêutrons entram no elemento de volume, como resultado do movimento através de duas faces perpendiculares, na direção x , isto é, as faces com coordenadas x e $x + \Delta x$, é, então,

$$\begin{aligned} \text{O número de nêutrons entrando no elemento de volume} \\ \text{por unidade de tempo (através da face em } x) \end{aligned} = v_x N(x, y, z) \Delta y \Delta z$$

e

$$\begin{aligned} \text{O número de nêutrons deixando o elemento de volume} \\ \text{por unidade de tempo (através da face em } x + \Delta x) \end{aligned} = v_x N(x + \Delta x, y, z) \Delta y \Delta z$$

onde v_x é a componente x da velocidade e os argumentos $(\underline{\Omega}, E, t)$ foram omitidos para simplificar. A diferença entre estes dois números fornece a componente x da variação do fluxo, isto é, a variação de mudança do fluxo angular de nêutrons em dV , devido àquelas que atravessam as duas faces do elemento de volume, para as quais, x é constante. Segue, portanto que,

$$\text{Variação do fluxo(coordenada } x) = -v_x \frac{\partial N}{\partial x} dV = -(v \cdot \nabla N)_x dV$$

e, então o número de nêutrons que ingressam no pequeno elemento de volume, devido ao fluxo, é $-v \cdot \nabla N$, por unidade de volume. esta quantidade é igual a $-v \underline{\Omega} \cdot \nabla N$ e, conseqüentemente,

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{dN}{dt} = -v \underline{\Omega} \cdot \nabla N \quad (\text{A.24})$$

A Equação de Transporte dada em (A.23) pode, também ser expressa em termos do fluxo angular ψ , que é igual a vN ; então, considerando,

$$\psi = vN = \psi(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \quad (\text{A.25})$$

e

$$\psi' = v'N' = \psi(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t) \quad (\text{A.26})$$

o resultado obtido é,

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{\Omega} \nabla \psi + \sigma_t \psi = \int \int \sigma'_t f \psi' d\underline{\Omega}' dE' + Q. \quad (\text{A.27})$$

APÊNDICE B A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO DEPENDENTE DA ENERGIA

Quando consideramos o comportamento de fótons e não o de nêutrons, é mais conveniente nos referirmos a energia liberada pela radiação e não pelo número de partículas, e trabalhar com uma quantidade $I(\underline{r}, E, \underline{\Omega})$, denominada intensidade de fluxo angular de energia, relacionada com a densidade do fluxo angular de energia, pela expressão,

$$I(\underline{r}, E, \underline{\Omega}) = E\psi(\underline{r}, E, \underline{\Omega}). \quad (\text{B.1})$$

Também, ao invés da variável energia E , é mais natural trabalhar com o comprimento de onda do fóton, λ , em unidades Compton. Isto é, usamos,

$$\lambda = \frac{0.511}{E},$$

onde E é dada em unidades Mev. Para o caso particular de um sistema independente do tempo, com fonte plana infinita na origem,

$$\mu \frac{\partial \psi(x, E, \mu)}{\partial x} + c(E)\psi(x, E, \mu) = \int_{4\pi} \int_0^\infty \sum (E' \rightarrow E; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) \psi(x, E', \mu') dE' d\underline{\Omega}' + S(E, \mu) \delta(x), \quad (\text{B.2})$$

onde usamos μ para a variável angular, c para o coeficiente de atenuação linear e $\delta(x)$ é a função Delta de Dirac.

Antes de obtermos a equação de transporte na forma desejada, para problemas com fótons, primeiro enunciaremos duas relações necessárias:

1. Como as partículas devem ser conservadas [26], podemos escrever,

$$\int_{\infty}^0 \psi(x, \lambda, \mu) d\lambda = \int_0^{\infty} \psi(x, E, \mu) dE. \quad (\text{B.3})$$

E como,

$$dE = \frac{-0,511d\lambda}{\lambda^2}, \quad (\text{B.4})$$

podemos escrever,

$$\int_{\infty}^0 \psi(x, \lambda, \mu) d\lambda = \int_{\infty}^0 0,511\psi(x, E, \mu) \frac{d\lambda}{\lambda^2}, \quad (\text{B.5})$$

isto é,

$$\lambda\psi(x, \lambda, \mu) = \frac{0,511}{\lambda}\psi(x, E, \mu), \quad (\text{B.6})$$

ou seja,

$$\lambda\psi(x, \lambda, \mu) = E\psi(x, E, \mu). \quad (\text{B.7})$$

Agora, definindo,

$$I(x, \lambda, \mu) = \lambda\psi(x, \lambda, \mu), \quad (\text{B.8})$$

segue que,

$$I(x, \lambda, \mu) = E\psi(x, E, \mu) = I(x, E, \mu). \quad (\text{B.9})$$

2. Pelo mesmo motivo de (1), podemos escrever o núcleo de espalhamento em termos do comprimento de onda como sendo,

$$\sum(E') = \int_{4\pi} \int_0^\infty \sum(E' \rightarrow E; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) dE d\underline{\Omega} = \int_{4\pi} \int_\infty^0 \sum(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) d\lambda d\underline{\Omega} = \sum(\lambda'), \quad (\text{B.10})$$

então,

$$0,511 \sum(E' \rightarrow E; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) \frac{d\lambda}{\lambda^2} = \sum(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) d\lambda, \quad (\text{B.11})$$

e, portanto,

$$E \sum(E' \rightarrow E; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) d\lambda = \lambda \sum(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) d\lambda. \quad (\text{B.12})$$

Voltando, agora, à equação (B.2), se multiplicarmos ambos os membros por E e usarmos a equação (B.9), obtemos,

$$\mu \frac{\partial I(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_0^\infty \frac{E}{E'} \sum(E' \rightarrow E; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) I(x, \lambda', \mu') dE' d\underline{\Omega}' + S(E, \mu) \delta(x). \quad (\text{B.13})$$

Agora, usando a equação (B.12), podemos escrever a equação (B.13)

como,

$$\mu \frac{\partial I(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + c(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_0^\lambda \widehat{\sum}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\underline{\Omega}' + S(\lambda, \mu) \delta(x). \quad (\text{B.14})$$

onde usamos,

$$S(\lambda, \mu) = ES(E, \mu), \quad (\text{B.15})$$

e,

$$\widehat{\sum}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) = \frac{\lambda}{\lambda'} \widehat{\sum}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}). \quad (\text{B.16})$$

A equação (B.14) é a formulação da equação de Boltzmann encontrada para melhor resolver problemas de fótons gamma. O efeito do fator $\frac{\lambda}{\lambda'}$ na equação (B.16) é “suavizar” a variação do espalhamento do núcleo.

Cumpramos observar, que neste trabalho usamos a notação $\psi(x, \lambda, \mu)$ ao invés de $I(x, \lambda, \mu)$.

APÊNDICE C TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO E ABSORÇÃO

Neste apêndice são apresentados os valores dos coeficientes de atenuação ($c(\lambda)$) e absorção (μ_a) da água, para as energias de interesse nesse trabalho. Esses coeficientes foram obtidos por interpolação através de uma Spline Cúbica usando o software Matlab [37].

Tabela C.1: *Coefficientes de atenuação e absorção 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 [Mev]	$c(\lambda)(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_{a_j}(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^2/\text{g}]$
1.25	0.0633	0.0295
0.5623	0.0920	0.0330
0.3627	0.1106	0.0326
0.2677	0.1238	0.0312
0.2121	0.1334	0.0300

Tabela C.2: *Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 2 Mev.*

E_j [Mev]	$c(\lambda)(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_{a_j}(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^2/\text{g}]$
2	0.0493	0.0260
0.6764	0.0847	0.0327
0.4070	0.1052	0.0328
0.2911	0.1203	0.0317
0.2266	0.1307	0.0303

Tabela C.3: *Dados do meio material considerado.*

Meio	$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	A	Z
Água	1.00	18	7.42