

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

**ABORDAGENS ANALÍTICAS PARA PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE
RADIAÇÃO COM DEPENDÊNCIA ESPECTRAL**

por

Janice Teresinha Reichert

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, agosto de 2009

ABORDAGENS ANALÍTICAS PARA PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE RADIAÇÃO COM DEPENDÊNCIA ESPECTRAL

por

Janice Teresinha Reichert
Mestre em Matemática

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof^a. Dr^a. Liliane Basso Barichello

Aprovada por:

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande (COPPE/UFRJ-RJ)

Prof. Dr. Rosenei Felipe Knackfuss (CCNE/UFSM-RS)

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França (PROMEC/UFRGS-RS)

Prof. Dr. Horácio Antonio Vielmo
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 31 de agosto de 2009

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer à minha orientadora Dra. Liliane Basso Barichello pelo incentivo incansável, pelo carinho, pelo entusiasmo profissional e pela oportunidade de participar de seu grupo de trabalho.

Ao Franchelo, por estar sempre ao meu lado dando amor, carinho e compreensão.

A minha família que sempre me apoiou durante essa caminhada, sempre entendendo a minha ausência e falta de tempo.

Aos meus colegas da Unochapecó, Graziela, Márcia, Maria Lúcia, Milton, Roberta e Sediane, que sempre me apoiaram e não me deixaram desistir nos momentos de dificuldade.

Aos colegas da UFRGS, Caio, Carmo, Daniel, Gustavo e João por todos os estudos e troca de conhecimento. Em especial ao Daniel e ao Gustavo pela ajuda na parte de programação.

E, principalmente a Deus, que sempre esteve do meu lado, nos momentos difíceis e nas alegrias, e a quem devo todas as minhas conquistas.

RESUMO

ABORDAGENS ANALÍTICAS PARA PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE RADIAÇÃO COM DEPENDÊNCIA ESPECTRAL

Neste trabalho são apresentadas soluções de caráter analítico, em forma fechada, para o problema de transporte para fótons, com dependência espectral, considerando o núcleo de Klein-Nishina para espalhamento Compton, o qual tem particular aplicação no cálculo de doses em tratamentos de radioterapia. Foram propostas duas abordagens: no caso 1, a variável comprimento de onda é discretizada, sendo que o termo integral da equação, em termos de energia, é aproximado por uma quadratura. No caso 2, uma expansão em termos de funções conhecidas é proposta para solução, de forma que se obtém uma expressão em forma fechada, dependendo continuamente em λ . Em todas as situações o problema resultante em termos da dependência angular, foi resolvido pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO). Simulações numéricas são obtidas para uma placa plana, com o cálculo do fluxo escalar, das doses e do fator de “buildup”.

Palavras-chave: Klein-Nishina; radioterapia; método analítico de ordenadas discretas.

Autor: Janice Teresinha Reichert

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Liliane Basso Barichello

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, agosto de 2009.

ABSTRACT

ANALYTICAL APPROACHES TO PROBLEMS OF TRANSPORT OF RADIATION WITH SPECTRAL DEPENDENCE

In this work, closed form solutions to the transport equation for photons are presented. The Klein-Nishina kernel for Compton scattering is considered, for a particular application in the radiotherapy doses planning. Two approaches are proposed: case 1, where the wavelength variable is discretized and the integral term of the equation is approximated by a quadrature scheme; case 2, where the solution is proposed as an expansion in terms of known functions. In the second case, in the final form of the solution, the dependence on the wavelength is continuous. For all cases, the resulting problem, which depends on the angular variable, is solved by the analytical discrete ordinates method (ADO method). Numerical simulations are performed, in a slab geometry, to generate results for the scalar flux, doses and buildup factor.

Keywords: Klein-Nishina kernel; radiotherapy; analytical discrete ordinates method.

Author: Janice Teresinha Reichert

Orientador: Prof^a. Dr^a. Liliane Basso Barichello

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, agosto de 2009.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE PARA FÓTONS E CONCEITOS RELACIONADOS	6
2.1	Equação de transporte para fótons	7
2.2	Análise do núcleo de espalhamento	13
2.3	O cálculo da dose e do fator de buildup	17
3	ABORDAGENS DISCRETAS DA DEPENDÊNCIA ESPECTRAL	20
3.1	Caso I: $\lambda \in [\lambda_0, \lambda_0 + 2]$ - Abordagem inicial	20
3.1.1	Solução da integral em λ usando a quadratura de Gauss	21
3.1.2	Solução da integral em λ usando a regra de Simpson	23
3.1.3	Tratamento da variável angular pelo método de ordenadas discretas ..	25
3.1.4	Comparação dos resultados numéricos	32
3.1.5	O problema heterogêneo	37
3.2	Caso II: Abordagem de λ_0 até λ	39
3.3	Caso III: Abordagem considerando $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ	42
4	RESULTADOS NUMÉRICOS DA ABORDAGEM DISCRETA	46
4.1	O fator de buildup escrito em termos do comprimento de onda	46
4.2	Resultados para o caso II - abordagem de λ_0 até λ	48
4.3	Resultados para o caso III - $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ	57
5	ABORDAGEM CONTÍNUA DA DEPENDÊNCIA ESPECTRAL	62
5.1	Condições de contorno	65
5.2	Expressões para as matrizes A , S e B_l :	67
5.3	Solução analítica por ordenadas discretas	68
6	RESULTADOS NUMÉRICOS DA ABORDAGEM CONTÍNUA	75

7 CONCLUSÕES.....	86
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	88
APÊNDICE.....	93
I TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO E ABSORÇÃO...	94

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

$I(x, \lambda, \mu)$	Fluxo angular de energia na direção μ , posição x para comprimento de onda λ
$D_T(x)$	Taxa de dose total absorvida
$D_0(x)$	Dose devido ao fluxo não colidido
$K(\lambda', \lambda)$	Núcleo de espalhamento de Klein-Nishina
M	Número de energias considerado
N	Número de pontos de quadratura
N_A	Constante de Avogadro
Z	Número atômico
A	Massa atômica
w_i	Pesos da quadratura de Gauss
$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$	Termo de fonte
E_0	Energia incidente no meio
$P_l(1 + \lambda' - \lambda)$	Polinômios de Legendre de ordem l
$m_e c^2$	Corresponde ao valor de 0.511 Mev

Letras Gregas

α	Constante dependente do meio
λ	Comprimento de onda do fóton espalhado
λ'	Comprimento de onda do fóton incidente
$\mu_a(\lambda)$	Coefficiente de absorção dependendo do comprimento de onda
ω_0	Cosseno do ângulo de espalhamento
ρ	Densidade do meio material
$\hat{\Phi}(x, \lambda)$	Fluxo escalar de partículas
$\vec{\Omega}$	Vetor ângulo sólido do fóton espalhado

$\vec{\Omega}'$	Vetor ângulo sólido do fóton incidente
$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$	Fluxo angular de partículas dependendo da posição \vec{r} , da energia E , da direção $\vec{\Omega}$
$\sigma(\lambda)$	Coefficiente de atenuação
$\lambda_{*r}, \lambda_{*j}$	Raízes da quadratura de Gauss
σ_T	Seção de choque de Thomson
$\vec{\nabla}$	Operador diferencial

LISTA DE FIGURAS

2.1	Espalhamento Compton, [Wood, 1982].	7
2.2	Núcleo de espalhamento de Klein-Nishina.	16
3.1	Condições de contorno.	32
4.1	Fluxos para uma placa de comprimento 3 MFP.	51
4.2	Dose total e dose devido à radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP.	52
4.3	Comparação entre os fatores de buildup em função do número de grupos de energia.	53
4.4	Fatores de buildup em função da energia incidente.	55
4.5	Fator de buildup para água, [Blizard e Abbott, 1962].	55
4.6	Dose total e dose devido à radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP pela abordagem do caso III.	59
4.7	Dose total e devido a radiação primária, para o chumbo numa placa de comprimento 3 MFP	61
6.1	Fluxos pela abordagem contínua, para quatro grupos de energia para uma placa de comprimento 3 MFP.	78
6.2	Dose total e dose devido a radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP.	78
6.3	Dose total para quatro grupos de energia para uma placa de comprimento 3 MFP, pelas abordagens (1) caso II, (2) caso III e (3) contínua.	79
6.4	Fluxos pela abordagem contínua, calculados em seis pontos discretos.	81
6.5	Dose total pela abordagem (1) caso II (de λ_0 até λ), (2) caso III e (3) contínua, para seis grupos de energia ou expansão em seis termos.	82
6.6	Dose devido a radiação primária pela abordagem (1) Caso II , (2) Caso III, (3) contínua, para seis grupos de energia ou expansão em seis termos.	83

LISTA DE TABELAS

3.1	Dose total para 8 grupos de energia por quadratura de Gauss.	34
3.2	Dose total para 10 grupos de energia por quadratura de Gauss.	34
3.3	Buildup para 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson.	36
3.4	Buildup para o chumbo com 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson.	36
3.5	Buildup para o chumbo com 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson com 4 pontos de quadratura para ADO.	36
3.6	Valores do Buildup para meio heterogêneo comparados com o método LTS_N	38
3.7	Valores do Buildup para meio heterogêneo comparados com o método LTS_N , com quatro pontos para ADO.	38
4.1	Fluxo escalar para quatro grupos de energia para o caso II.	50
4.2	Taxa de dose total e dose devido à radiação primária para 4 grupos de energia.	51
4.3	Fator de buildup para energia incidente de $1Mev$ em função do número de grupos de energia considerados.	52
4.4	Fator de buildup para energia incidente de $2Mev$ em função do número de grupos de energia considerados.	54
4.5	Fator de buildup para energia incidente de $0.6Mev$ em função do número de grupos de energia considerados.	54
4.6	Fator de buildup para energia incidente de $1Mev$	56
4.7	Convergência numérica do método ADO, considerando a abordagem do caso II.	57
4.8	Taxa de dose total e dose devido a radiação primária para a abordagem do caso III.	58
4.9	Comparação do fator de buildup para as duas metodologias.	59
4.10	Convergência numérica do método ADO, considerando a abordagem do caso III.	60
4.11	Dose total e dose devido a radiação primária para o chumbo pelo caso III. ...	61
6.1	Fluxo escalar para expansão em quatro termos, pela abordagem contínua do problema.	77

6.2	Fluxo escalar para quatro grupos de energia pela abordagem de λ_0 até λ	77
6.3	Dose total e dose devido a radiação primária para quatro grupos de energia pela abordagem (1) caso II - de λ_0 até λ , (2) caso III - de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ e (3) contínua.	79
6.4	Fluxo escalar para expansão com quatro termos, pela abordagem contínua do problema, calculados em seis comprimentos de onda.	80
6.5	Fluxo escalar para seis termos na expansão, pela abordagem contínua do problema, calculados em seis comprimentos de onda.	81
6.6	Dose total e dose devido a radiação primária para seis grupos de energia pela abordagem (1) Caso II (de λ_0 até λ), (2) Caso III (de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ) e (3) contínua (expansão em seis termos).	82
6.7	Comparação do fator de buildup.	84
6.8	Comparação do fator de buildup em função do número de termos na expansão em polinômios de Legendre.	84
I.1	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de $1Mev$	94
I.2	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de $1Mev$	94
I.3	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de $1Mev$ para água.	95
I.4	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de $1Mev$ para água.	95
I.5	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando regra de Simpson, cinco valores de energia e energia incidente de $1.25Mev$	96
I.6	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de $0.6Mev$	96
I.7	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de $0.6Mev$	96

I.8	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de 0.6Mev ...	97
I.9	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de 0.6Mev ...	97
I.10	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de 2Mev ...	98
I.11	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de 2Mev	98
I.12	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de 2Mev ...	99
I.13	Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de 2Mev	99
I.14	Dados obtidos para água e chumbo para o cálculo da constante α	100

1 INTRODUÇÃO

Vários são os problemas em ciências e tecnologia, onde a dependência espectral (de energia) assume papel relevante na solução do problema de transferência radiativa. Podemos citar, como alguns exemplos, o trabalho de [Bond, 2001], que refere-se a dependência espectral da luz visível na absorção de partículas de carbono emitidas pela combustão do carvão; [Solovjov e Webb, 2002], onde um novo modelo local de correlação é desenvolvido para a equação de transferência radiativa em um gás não uniforme, em altas temperaturas; [Souto, 2006], que se refere à recuperação de perfis verticais de propriedade óticas inerentes a partir da radiação emergente da água; [Maurente, 2007], que aplica o método de Monte Carlo ao modelamento espectral de meios participantes através da utilização da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção, e [Wellele, 2007], que propõem uma metodologia para a identificação das propriedades termofísicas de materiais semitransparentes a altas temperaturas. Nestes problemas em geral, a dependência espectral é abordada de forma discretizada (na forma de camadas ou bandas de energia). Outro caso onde a dependência espectral é relevante, na solução da equação de transporte para fótons, é no cálculo de doses para tratamentos de radioterapia [Wood, 1982].

De fato, a história das radiações, de acordo com [Attix, 1986], inicia em 1895 com a descoberta dos raios X por W.C. Röntgen. Em 1896 A. H. Becquerel descobre, o que Pierre e Marie Currie denominariam, em 1898, de radioatividade. Não demorou muito para se perceber a importância dos raios X no diagnóstico médico. Em 1896 Lister na Inglaterra e Grubbena e Ludlam nos Estados Unidos sugeriram que os raios X poderiam ser úteis no tratamento do câncer [Bames e Rees, 1972]. As primeiras tentativas não tiveram grande sucesso; entretanto, hoje a terapia de radiação é reconhecida como um importante instrumento no tratamento de muitos tipos de câncer [Schwartzmann, 1991].

A radioterapia, utiliza a radiação no tratamento de tumores, principalmente os malignos, e baseia-se na destruição de tumores pela absorção de energia da radiação, [Bitelli, 2006]. De acordo com [Fraass, 2008] a radioterapia moderna utiliza máquinas e técnicas sofisticadas para o cálculo da dose de radiação recebida pelo tumor, minimizando o dano em tecidos vizinhos normais, porém erros ainda ocorrem no cálculo da dose aplicada em pa-

cientos. Artigos recentes na área de medicina, [Krämer et al., 2000], [Henríquez e Castrillón, 2008], [Elsässer et al., 2008], mostram a busca de modelos matemáticos para o cálculo da dose com precisão. Este modelos são em geral, baseados em dados experimentais e aproximações probabilísticas.

Para compreender como ocorre a interação da radiação com a matéria, e analisar a energia depositada (dose) faz-se necessário um bom entendimento da distribuição do fluxo de radiação num determinado meio [Johns e Cunningham, 1983]. Uma das forma de se obter o fluxo de radiações é através da equação de transporte para partículas e fótons, que foi introduzida no fim do século XIX por Ludwig Boltzmann, em seus estudos da teoria cinética de gases [Bell e Glasstone, 1970].

Na busca de soluções para a equação de transporte, destaca-se o trabalho publicado por K.M.Case [Case e Zweifel, 1967], onde um método exato de solução, o chamado método das soluções elementares, foi rigorosamente desenvolvido. No entanto, apesar de sua elegância matemática e dos vários desenvolvimentos adicionais nele introduzidos durante as décadas de 60 e 70, na prática, o método só pode ser utilizado para resolver problemas de transporte idealizados (uma dimensão espacial, em alguns casos com restrição a meios homogêneos) [Garcia, 2002].

De forma geral, para a resolução da equação de transporte, existem duas abordagens bem definidas: os métodos de modelagem computacional probabilística, como o método de Monte Carlo, [Howell e Perlmutter, 1964], [Duderstadt e Martin, 1979], e os métodos de abordagem determinística como os métodos P_N (expansão em harmônicos esféricos), [Jeans, 1917], e o método de ordenadas discretas [Chandrasekhar, 1960].

Segundo [Chalhoub e Garcia, 2000] o método de ordenadas discretas foi introduzido por Wick e Chandrasekhar na década de quarenta. A versão original baseava-se em aproximar a integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica e em resolver analiticamente o conjunto de equações diferenciais ordinárias resultante para a função de distribuição de partículas nos pontos de quadratura. Uma dificuldade na aplicação da solução em ordenadas discretas como proposta por [Chandrasekhar, 1960] está basicamente no cálculo das constantes de separação associadas às soluções elementares do problema, que são encontradas como raízes de uma função característica.

Uma versão mais recente do método de ordenadas discretas, o método analítico de ordenadas discretas (ADO), publicado por [Barichello e Siewert, 1999] difere do método original, pelo uso do esquema de quadratura arbitrário e pela determinação das constantes de separação através da resolução de um problema de autovalor. O método (ADO) tem-se mostrado como uma ferramenta muito útil na resolução de vários problemas, particularmente na área de dinâmica de gases rarefeitos [Barichello et al., 2001], [Siewert, 2003a], [Camargo e Barichello, 2004], [Cabrera e Barichello, 2006], [Knackfuss e Barichello, 2006].

O método ADO, [Barichello e Siewert, 1999], foi aplicado também para problemas em que ocorre dependência energética do fluxo angular de nêutrons, empregando-se uma aproximação de multigrupos de energia, [Siewert, 2000]. De fato, o trabalho pioneiro de desenvolvimento deste método [Barichello e Siewert, 1999], diz respeito à solução de um problema com dependência espectral, de aplicação na área de astrofísica, envolvendo espalhamento completamente não coerente.

Para problemas envolvendo a equação de transporte com dependência espectral, é comum encontrar-se na literatura referências ao método probabilístico de Monte Carlo, [Hirayama, 1986], [Chen e Faw, 1993], [Hirayama, 1994a],[Hirayama, 1994b], [Hirayama, 1995], [Hirayama, 1998], [Yoshida, 2006], [Shirani e Shahriari, 2007], [Maurense, 2007]. Dentre as abordagens determinísticas do problema envolvendo a equação de transporte com dependência espectral encontra-se os trabalhos de [Trindade, 1997], [Sauer, 1997], [Lunelli, 2002], [Souto, 2006], [Rodrigues et al., 2006] que utilizam os métodos LTP_N (expansão em polinômios de Legendre da parte angular do fluxo e aplicação da transformada de Laplace na variável espacial) e LTS_N (aplicação da transformada de Laplace à variável espacial da equação de ordenadas discretas, resultando em um sistema linear algébrico para o fluxo transformado que posteriormente é invertido analiticamente) na resolução de problemas unidimensionais e bidimensionais.

No problema de radioterapia, um dos aspectos de maior interesse é o cálculo da dose (ou energia depositada), que depende da solução da equação de transferência radiativa, uma vez que é definida em termos da intensidade de radiação. Devido à complexidade das expressões apresentadas no cálculo do fluxo de radiação, o fator de buildup é utilizado como um parâmetro de correção entre o fluxo que inclui o espalhamento e o fluxo devido aos fótons não espalhados [Goldstein, 1959]. Na literatura, é comum se en-

contrar resultados para dose e fator de buildup obtidos a partir de soluções e métodos, como o clássico método dos momentos, [Wood, 1982], desenvolvidos particularmente para meios infinitos e semi-infinitos. Para o caso de meio finito (placas), técnicas de correção [Fano et al., 1959], [Blizard e Abbott, 1962] ou aproximação [Hirayama, 1986] são desenvolvidos. Segundo [Blizard e Abbott, 1962] as condições de contorno introduzidas na placa possuem o efeito de reduzir o fluxo próximo a superfície, quando comparado com o fluxo em um meio infinito na mesma distância da fonte. Esta redução é causada pela fuga ou “leakage” dos raios gama da superfície da placa, que desta forma não contribuem para o fluxo após o espalhamento.

Por outro lado, alguns resultados apresentados na literatura utilizando os métodos determinísticos LTP_N e LTS_N para problemas envolvendo o cálculo da dose e do fator de buildup, considerando placa plana, [Trindade, 1997], [Lunelli, 2002], [Rodrigues, 2007], consideram a formulação do problema restrito apenas a uma pequena faixa de energia (de λ_0 até $\lambda_0 + 2$, onde λ_0 depende da energia do feixe incidente E_0), e não sobre todo o domínio de definição do intervalo de energia, desprezando a dificuldade maior presente na equação (integral dependente do comprimento de onda).

Neste trabalho, soluções de carácter analítico são propostas para a equação de transporte de fótons, levando ao cálculo dos fluxos de radiação, dose e fator de buildup. Particularmente problemas em meio finito são abordados e o intervalo de energia total, $[\lambda_0, \infty)$, de definição do problema é considerado. Em todas as situações analisadas o problema resultante, após o tratamento da variável energia, e com dependência angular, é semelhante e, é resolvido pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO). Aqui destacam-se principalmente a característica do método de ordenadas discretas (ADO) no que se refere à utilização do esquema de quadratura no semi-intervalo que implica num ganho de eficiência computacional, uma vez que a utilização deste esquema leva a problemas de autovalores de ordem reduzida à metade dos casos anteriores.

Visando cumprir o objetivo proposto, o texto deste trabalho está organizado em sete capítulos. O capítulo 2 tem o carácter de apresentar a dedução detalhada da equação de transporte para fótons considerando-se o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, para o espalhamento Compton, característico do espalhamento de fótons em baixas energias, e os aspectos relacionados com o cálculo da dose e do fator de buildup.

No capítulo 3 propõem-se a discretização da dependência espectral, onde são analisados três casos. O caso I refere-se a um estudo comparativo, no sentido de validação dos resultados numéricos, em que o problema é resolvido para o intervalo de energia de λ_0 até $\lambda_0 + 2$, comparando-se os resultados numéricos com os apresentados na literatura. Apresentam-se aqui as duas metodologias utilizadas na resolução do problema, deixando claro ao leitor que trata-se apenas de uma aproximação do problema real, mas que pode ser comparado com outros autores como, [Trindade, 1997], [Sauer, 1997], [Lunelli, 2002], [Rodrigues, 2007], mostrando que o método analítico de ordenadas discretas (ADO) aplica-se muito bem a este problema. Os casos II e III referem-se à discretização da dependência espectral considerando-se o intervalo de energia $[\lambda_0, \infty)$. As simulações numéricas para os casos II e III e comparações dos resultados entre as duas metodologias e com aproximações em meio infinito e semi-infinito, disponíveis na literatura, são apresentadas no capítulo 4.

No capítulo 5, apresenta-se a formulação contínua do problema com dependência espectral, para fótons em uma placa plana. Esta abordagem se baseia em um método espectral [Boyd, 2000], onde a função solução é expandida em termos de funções conhecidas. Encontram-se expressões, através de matrizes constantes, que serão os coeficientes de entrada no problema de transporte. Estes coeficientes são determinados através de integrais envolvendo polinômios de Legendre. A partir do cálculo dos coeficientes iniciais resolve-se o sistema resultante através do método de ordenadas discretas (ADO). Não temos conhecimento de abordagem semelhante para problemas envolvendo fótons, o que caracteriza a originalidade deste trabalho. As simulações numéricas e comparação com os resultados das abordagens discretas (casos II e III) e resultados, de aproximações do problema para placa, disponíveis na literatura estão no capítulo 6. E, finalmente no capítulo 7, são apresentadas as conclusões do presente trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE PARA FÓTONS E CONCEITOS RELACIONADOS

O fenômeno complexo de transferência radiativa pode ser analisado como uma sucessão de interações entre fótons e a matéria, ou entre as partículas secundárias e a matéria. Cada processo elementar subdivide a energia do fóton ou partícula incidente. A radiação é refletida em várias direções, e a penetração ocorre associada com degradação e difusão. Na maioria dos espalhamentos envolvendo fótons, três interações dominantes precisam ser consideradas: espalhamento Compton, produção de pares e efeito fotoelétrico [Shultis e Faw, 2000]. Porém, para fótons com energia entre 1Mev (Mega Eletron Volts) e 10Mev (Mega Eletron Volts) e para elementos com baixo e intermediário número atômico o espalhamento Compton é predominante [Wood, 1982], [Goldstein, 1959], [Blizard e Abbott, 1962]. Desta forma, se a energia incidente for próxima de 1Mev , como ocorre na maioria dos problemas analisados neste trabalho, pode-se considerar, na descrição do transporte de fótons, apenas o espalhamento Compton, ou efeito Compton, descoberto em 1923 por A. H. Compton [Shultis e Faw, 2000]. Neste espalhamento, o fóton ao colidir com um elétron perde energia e muda sua direção original sobrevivendo à colisão. O efeito sobre o fóton incidente é semelhante ao efeito da interação de um nêutron e o núcleo do elemento [Wood, 1982]. A relação entre o fóton refletido e a energia perdida, é determinada considerando-se a conservação do momento e energia entre o fóton e o elétron recolhido. Esta relação pode ser escrita como [Wood, 1982],

$$\frac{E}{E_0} = \frac{1}{1 + (\frac{E_0}{m_e c^2})(1 - \cos\theta)}, \quad (2.1)$$

onde E_0 e E são respectivamente, a energia do fóton antes e após a colisão em Mev , $m_e c^2$ é a energia restante do elétron e θ é o ângulo de reflexão do fóton, conforme pode-se observar na figura (2.1),

Nos cálculos envolvendo raios gama é mais conveniente utilizar-se a variável comprimento de onda, adimensional, considerando,

$$\lambda = \frac{0.511\text{Mev}}{E}, \quad (2.2)$$

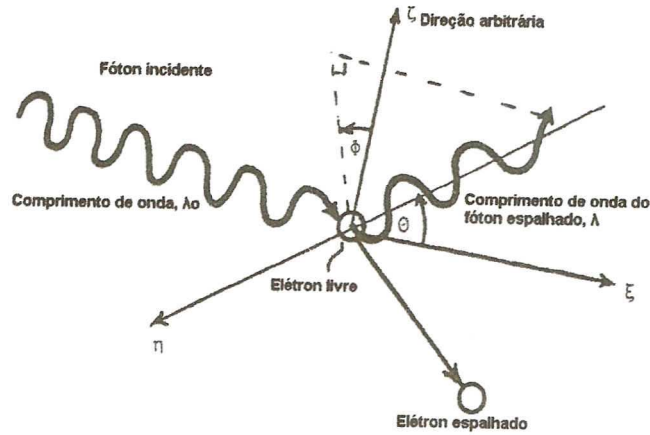


Figura 2.1 – Espalhamento Compton, [Wood, 1982].

onde E é a energia do fóton em MeV . De onde, a relação entre a mudança de comprimento de onda do fóton e o ângulo de espalhamento é escrita como,

$$\lambda - \lambda' = 1 - \cos\theta, \quad (2.3)$$

onde λ' é o comprimento de onda do fóton antes do espalhamento, λ é o comprimento de onda após o espalhamento e θ é o ângulo de espalhamento. Observa-se que o valor máximo ocorre quando o ângulo refletido é de 180° , de onde $0 \leq \lambda - \lambda' \leq 2$, ou seja $\lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2$. Além disto, a teoria e os efeitos, que assume o elétron livre e em repouso, é devida a Klein e Nishina (1929), sendo usual representar o espalhamento para fótons através do núcleo de Klein-Nishina para o espalhamento Compton, que será abordado na seção seguinte.

2.1 Equação de transporte para fótons

Nesta seção apresenta-se a equação de transporte integro-diferencial para o fluxo angular $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ num meio homogêneo. Esta equação fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional e energética do fluxo em um meio [Garcia, 2002]. Para isto, considera-se que o número de partículas $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ está relacionado com o fluxo angular de partículas através da expressão,

$$\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \nu n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (2.4)$$

onde ν é a velocidade da partícula. No caso de fótons $\nu = c$, a velocidade da luz [Shultis e Faw, 2000].

A fim de se obter a equação para $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$, considera-se um balanço de partículas num volume arbitrário V com uma superfície fechada S , para as partículas com energia em dE sobre E movendo-se em $d\vec{\Omega}$ na direção $\vec{\Omega}$, [Shultis e Faw, 2000],

$$\begin{aligned} &\{(a)\text{Taxa de saída em } V \text{ através de } S\} + \{(b)\text{Taxa em que as partículas interagem em } V\} = \\ &\{(c)\text{ Taxa em que partículas secundárias com energia } E \text{ e direção } \vec{\Omega} \text{ são produzidas}\} + \\ &\{(d)\text{Taxa de produção por fontes em } V\}, \quad (2.5) \end{aligned}$$

onde,

- (a) representa o número de partículas que saem de V através de S por unidade de tempo, sem sofrer colisões;
- (b) é o número total de partículas que sofrem colisões em V por unidade de tempo (trocam sua energia e/ou direção ou simplesmente são absorvidas);
- (c) representa o número de partículas secundárias em dE sobre E movendo-se em $d\vec{\Omega}$ sobre $\vec{\Omega}$ que são produzidas em V pela interação partícula-meio, por unidade de tempo;
- (d) número de partículas em dE sobre E movendo-se em $d\vec{\Omega}$ na direção $\vec{\Omega}$ que são introduzidas em V por unidade de tempo, por fontes.

A equação de transporte pode ser obtida para $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ expressando-se matematicamente cada uma das componentes da equação de balanço (2.5), considerando que,

$$\vec{n} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE d\vec{\Omega}, \quad (2.6)$$

representa o número de partículas com energia em dE sobre E na direção de $d\vec{\Omega}$ sobre $\vec{\Omega}$, que atravessam uma unidade de área (com normal \vec{n}) por unidade de tempo, no ponto \vec{r} ,

escreve-se o termo (a) da equação de balanço como,

$$(a) = \left[\int_S \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dS \right] dE d\vec{\Omega}, \quad (2.7)$$

e através do teorema da divergência de Gauss [Apostol, 1969], escreve-se a integral (2.7) sobre uma superfície S como uma integral sobre o volume V,

$$(a) = \left[\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega}, \quad (2.8)$$

onde $\vec{\nabla}$ é o operador diferencial,

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}, \quad (2.9)$$

e, como $\vec{\nabla}$ esta relacionado apenas com a parte espacial, tem-se,

$$(a) = \left[\int_V \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega}. \quad (2.10)$$

Para o termo (b),

$$(b) = \left[\int_V \sigma(E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega}, \quad (2.11)$$

onde $\sigma(E)$ é o coeficiente de interação, que no caso de fótons é denominado coeficiente total de atenuação. Assumindo-se que as partículas secundárias surgem quando ocorre interação, escreve-se o termo (c) como,

$$(c) = \left[\int_V \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' dV \right] dE d\vec{\Omega}, \quad (2.12)$$

também denominado termo de espalhamento.

Finalmente, se

$$(d) = \left[\int_V S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega}, \quad (2.13)$$

denota a taxa de produção de partículas por unidade de volume, no ponto \vec{r} , através de fontes localizadas em V , escreve-se a equação de balanço (2.5) como,

$$\begin{aligned} & \left[\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega} + \left[\int_V \sigma(E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega} = \\ & \left[\int_V \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' dV \right] dE d\vec{\Omega} + \left[\int_V S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dV \right] dE d\vec{\Omega}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \int_V \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sigma(E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' \right. \\ \left. - S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] dV = 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Como o volume V é arbitrário, toda a expressão do integrando da equação (2.15) precisa ser nula, de onde,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sigma(E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' \\ + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.16)$$

A equação (2.16) para o fluxo angular $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ é denominada equação de transporte ou equação de Boltzmann [Shultis e Faw, 2000].

No caso específico de fótons, a quantidade de interesse será a **intensidade de radiação**, relacionada com o fluxo angular de partículas pela expressão,

$$I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = E \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad (2.17)$$

de onde, multiplicando toda a equação (2.16) por E , tem-se,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} E \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sigma(E) E \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{E}{E'} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) E' \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' \\ &+ ES(\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (2.18)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sigma(E) I(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{E}{E'} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) I(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' \\ &+ ES(\vec{r}, E, \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para o caso particular em meio unidimensional e fonte plana infinita na origem, com simetria azimutal onde a dependência angular é escrita por $\mu = \cos\theta$, e θ é o ângulo entre a direção do fóton e o eixo x , a equação (2.19) é escrita como,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, E, \mu) + \sigma(E) I(x, E, \mu) &= \int_{4\pi} \int_0^\infty \frac{E}{E'} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) I(x, E', \mu') dE' d\vec{\Omega}' \\ &+ ES(E, \mu) \delta(x), \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac.

No que diz respeito ao termo integral na equação (2.20), dependente da energia E' , observa-se que o núcleo de espalhamento é nulo para $E' < E$, [Wood, 1982], [Fano et al., 1959], [Shultis e Faw, 2000], assim o limite inferior na equação (2.20) para E' pode ser substituído por E sem perda de generalidade. Além disto, para uma fonte real considera-se um valor máximo E_0 , de onde $I(x, E, \mu) = 0$ para $E > E_0$, e o limite superior na integração sobre E' pode ser substituído por E_0 , o que faz com que a equação (2.20) seja reescrita como,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, E, \mu) + \sigma(E) I(x, E, \mu) &= \int_{4\pi} \int_E^{E_0} \frac{E}{E'} \Sigma(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) I(x, E', \mu') dE' d\vec{\Omega}' \\ &+ ES(E, \mu) \delta(x). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Além disto, considera-se a equação (2.21) escrita em termos de comprimento de onda

λ , adimensional, relacionado com a energia do fóton pela relação,

$$\lambda = \frac{m_e c^2}{E}, \quad (2.22)$$

onde $m_e c^2 = 0.511 \text{ Mev}$ (Mega Eletron Volts) ou $8.1871 \times 10^{-14} \text{ J}$ e a energia do fóton E é dada em Mev .

Para isto observa-se inicialmente que,

$$I(x, E, \mu) = I(x, \lambda, \mu), \quad (2.23)$$

$$dE = -m_e c^2 \frac{d\lambda}{\lambda^2}, \quad (2.24)$$

$$\frac{E}{E'} = \frac{\lambda'}{\lambda}, \quad (2.25)$$

de onde encontra-se para a equação (2.21),

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_{\lambda}^{\lambda_0} \frac{\lambda'}{\lambda} \Sigma\left(\frac{m_e c^2}{\lambda'} \rightarrow \frac{m_e c^2}{\lambda}; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}\right) I(x, \lambda', \mu') \times \\ \left(-\frac{m_e c^2}{\lambda'^2}\right) d\lambda' d\vec{\Omega}' + \frac{m_e c^2}{\lambda} S\left(\frac{m_e c^2}{\lambda}, \mu\right) \delta(x), \end{aligned} \quad (2.26)$$

chamando,

$$\frac{m_e c^2}{\lambda'^2} \Sigma\left(\frac{m_e c^2}{\lambda'} \rightarrow \frac{m_e c^2}{\lambda}; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}\right) = \Sigma(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}), \quad (2.27)$$

e ainda,

$$\frac{m_e c^2}{\lambda} S\left(\frac{m_e c^2}{\lambda}, \mu\right) = S(\lambda, \mu), \quad (2.28)$$

$$\frac{\lambda'}{\lambda} \Sigma(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}), \quad (2.29)$$

tem-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_{\lambda_0}^{\lambda} \hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\vec{\Omega}' + S(\lambda, \mu) \delta(x). \quad (2.30)$$

onde $\sigma(\lambda)$ representa o coeficiente de atenuação em cm^{-1} , para o comprimento de onda λ .

2.2 Análise do núcleo de espalhamento

Para o termo de espalhamento na equação (2.30), pode-se escrever, [Wood, 1982],

$$\hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = K(\lambda', \lambda) \delta(1 + \lambda' - \lambda - \vec{\Omega}' \vec{\Omega}), \quad (2.31)$$

onde,

$$\omega_0 = \vec{\Omega}' \vec{\Omega} = \cos(\theta). \quad (2.32)$$

A função delta de Dirac que aparece na equação (2.31) indica que, para cada comprimento de onda, existe apenas um ângulo espalhado, ou seja

$$\lambda - \lambda' = (1 - \cos\theta) \quad (2.33)$$

onde λ' refere-se ao comprimento de onda do fóton incidente e λ ao comprimento de onda do fóton espalhado, θ é o ângulo de espalhamento formado por $\vec{\Omega}'$ e $\vec{\Omega}$, onde $\vec{\Omega}'$ é a direção da partícula antes do espalhamento e $\vec{\Omega}$ é a direção da partícula após o espalhamento. O

valor máximo de variação é duas unidades Compton e ocorre quando o fóton é refletido num ângulo de 180°.

A expressão para $\delta(1 + \lambda' - \lambda - \vec{\Omega}'\vec{\Omega})$ é escrita em termos de polinômios de Legendre como,

$$\delta(1 + \lambda' - \lambda - \vec{\Omega}'\vec{\Omega}) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2n+1}{2}\right) P_n(\omega_0) f_n(\lambda', \lambda), \quad (2.34)$$

onde,

$$f_n(\lambda', \lambda) = \int_{-1}^1 \delta(1 + \lambda' - \lambda - \omega_0) P_n(\omega_0) d\omega_0 = P_n(1 + \lambda' - \lambda). \quad (2.35)$$

Portanto,

$$\delta(1 + \lambda' - \lambda - \omega_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2n+1}{2}\right) P_n(1 + \lambda' - \lambda) P_n(\omega_0), \quad (2.36)$$

truncando a soma até L , tem-se para a equação (2.31),

$$\hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) = K(\lambda', \lambda) \sum_{n=0}^L \left(\frac{2n+1}{2}\right) P_n(1 + \lambda' - \lambda) P_n(\vec{\Omega}'\vec{\Omega}), \quad (2.37)$$

onde,

$$P_n(\vec{\Omega}'\vec{\Omega}) = \sum_{l=n}^L \beta_l P_l(\mu) P_l(\mu') \cos[n(\phi' - \phi)], \quad (2.38)$$

assim,

$$\hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) = K(\lambda', \lambda) \sum_{n=0}^L \left(\frac{2n+1}{2}\right) P_n(1 + \lambda' - \lambda) \sum_{l=n}^L \beta_l P_l(\mu) P_l(\mu') \cos[n(\phi' - \phi)], \quad (2.39)$$

e, a expressão para o espalhamento, do lado direito na equação (2.30) será,

$$\int_{4\pi} \int_{\lambda_0}^{\lambda} \hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\vec{\Omega}' = \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} I(x, \lambda', \mu') K(\lambda', \lambda) \times \\ \sum_{n=0}^L \left(\frac{2n+1}{2} \right) P_n(1 + \lambda' - \lambda) \sum_{l=n}^L \beta_l P_l(\mu) P_l(\mu') \cos[n(\phi' - \phi)] d\phi' d\mu' d\lambda', \quad (2.40)$$

porém,

$$\int_0^{2\pi} \cos[n(\phi' - \phi)] d\phi' = \begin{cases} 2\pi & \text{se } n = 0 \\ 0 & \text{se } n \neq 0, \end{cases} \quad (2.41)$$

de onde tem-se, que o lado direito da equação (2.40) é igual a,

$$2\pi \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 \sum_{n=0}^L \left(\frac{2n+1}{2} \right) P_n(1 + \lambda' - \lambda) P_n(\mu) P_n(\mu') K(\lambda', \lambda) I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \quad (2.42)$$

Aqui, considera-se $K(\lambda', \lambda)$ como o núcleo de Klein-Nishina (1929), para espalhamento Compton [Duderstadt e Martin, 1979], [Wood, 1982], [Fano et al., 1959], [Shultis e Faw, 2000],

$$K(\lambda', \lambda) = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right) \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right], \quad (2.43)$$

onde N_A é o número de Avogadro (6.02×10^{23} / mol), Z, A e ρ são, respectivamente, o número atômico, a massa atômica e a densidade do meio; $\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 = 6.65245 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$ é a seção de choque de Thomson, e,

$$\alpha = \frac{N_A Z \sigma_T \rho}{A} = 0,40061 \frac{Z \rho}{A} [\text{cm}^{-1}]. \quad (2.44)$$

Desta forma, considerando o problema homogêneo (termo de fonte nulo), tem-se,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \alpha \sum_{n=0}^L \left(\frac{2n+1}{2} \right) P_n(\mu) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_n(1 + \lambda' - \lambda) \times P_n(\mu') I(x, \mu', \lambda') d\mu' d\lambda', \quad (2.45)$$

com núcleo de espalhamento escrito como,

$$K(\lambda', \lambda) = \begin{cases} \frac{3}{8} \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right) \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] & \text{se } \lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2 \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.46)$$

pois, $\lambda - \lambda' = 1 - \cos(\theta)$, de onde $0 \leq \lambda - \lambda' \leq 2$, ou seja $\lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2$.

Onde o gráfico para o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, para o intervalo de energia de $[0.511, 4]$, pode ser observado na figura seguinte,

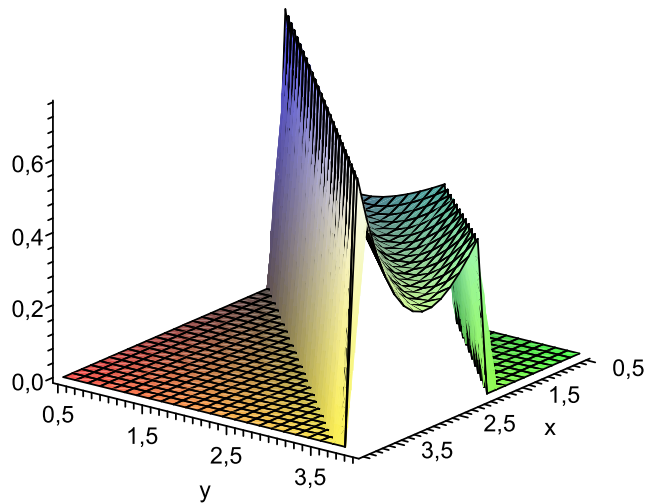


Figura 2.2 – Núcleo de espalhamento de Klein-Nishina.

Devido à característica do espalhamento Compton, e conforme definição do núcleo de Klein-Nishina (2.46), o termo integral na equação (2.45) de fato tem limite inferior igual a λ_0 ou $\lambda - 2$, o que for maior, conforme já foi observado por [Fano et al., 1959]. Desta forma, nos capítulos seguintes propõe-se soluções analíticas para a equação (2.45), com limite de integração de λ_0 até λ e também para o caso de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ , considerando-se que

a intensidade de radiação $I(x, \lambda, \mu)$, seja conhecida nas fronteiras do domínio.

2.3 O cálculo da dose e do fator de buildup

Uma das aplicações da equação transporte aplicada a problemas envolvendo fótons está na radioterapia, onde é comum encontrar-se referências ao cálculo de dose ou energia depositada. Para isto, observa-se que o fluxo escalar total de radiação para fótons $\hat{\Phi}(x, E)$ está dividido em duas componentes [Shultis e Faw, 2000], a componente $\hat{\Phi}_0(x, E)$ corresponde ao fluxo não colidido e, é devido aos fótons que saem da posição x e não sofrem interações com o meio. A componente $\hat{\Phi}_s(x, E)$ corresponde ao fluxo colidido e consiste nos fótons colididos uma ou mais vezes.

Desta forma, a dose total $D_T(x)$ no ponto de interesse, é a soma da dose não colidida (primária) e da dose colidida (secundária),

$$D_T(x) = D_0(x) + D_s(x). \quad (2.47)$$

Com relação a acumulação de raios gama secundários, é conveniente abordar-se a razão entre a quantidade total de raios gama em um ponto, e a quantidade de raios gama devido apenas a radiação primária neste ponto. Esta razão é denominada fator de buildup [Blizard e Abbott, 1962]. Este fator, corrige o fluxo não espalhado, em relação ao fluxo que inclui o espalhamento [Goldstein, 1959] e, conforme [Shultis e Faw, 2000] o fator de buildup $B(x)$ é definido como a razão da dose total em relação à dose não colidida,

$$B(x) = \frac{D_T(x)}{D_0(x)}, \quad (2.48)$$

onde [Goldstein, 1959] define,

$$D_T(x) = \int_0^{E_0} \mu(E) \hat{\Phi}(x, E) dE, \quad (2.49)$$

e, $D_0(x)$ corresponde à dose devido ao fluxo não colidido $\hat{\Phi}(x, E_0)$, de onde tem-se,

$$B(x) = \frac{\int_0^{E_0} \mu(E) \hat{\Phi}(x, E) dE}{\int_0^{E_0} \mu(E_0) \hat{\Phi}(x, E_0) dE}, \quad (2.50)$$

e, o fluxo escalar $\hat{\Phi}(x, E)$ é definido em termos da intensidade de radiação, [Fano et al., 1959], [Duderstadt e Martin, 1979],

$$\hat{\Phi}(x, E) = \int_{-1}^1 I(x, E, \mu) d\mu. \quad (2.51)$$

Com relação ao coeficiente $\mu(E)$ dependendo do problema pode-se ter, [Shultis e Faw, 2000],

- (1) μ_a , denominado coeficiente de absorção linear [Shultis e Faw, 2000], ou coeficiente de absorção de massa [Wood, 1982],

$$\mu_a = \mu_{ph} + \mu_{pp} + f_c \mu_c, \quad (2.52)$$

onde,

μ_{ph} é o efeito fotoelétrico,

μ_{pp} representa a produção de pares,

μ_c representa o espalhamento compton,

f_c é a fração de energia incidente de fótons transferida devido ao espalhamento compton.

- (2) μ'_{tr} denominado coeficiente de transferência de pseudo-energia, utilizado em geral, como uma definição alternativa de μ_{tr} , e definido por,

$$\mu'_{tr} = \mu_{ph} + f_{pp} \mu_{pp} + f_c \mu_c, \quad (2.53)$$

onde,

f_{pp} é a fração de energia de fótons transferida devido a produção de pares.

- (3) μ_{tr} denominado coeficiente de transferência de energia, e dado por,

$$\mu_{tr} = f_{ph}\mu_{ph} + f_{pp}\mu_{pp} + f_c\mu_c, \quad (2.54)$$

onde,

f_{ph} é a fração de energia incidente transferida devido ao efeito fotoelétrico.

(4) μ_{en} denominado coeficiente de absorção de energia e dado por,

$$\mu_{en} = (1 - G_{ph})f_{ph}\mu_{ph} + (1 - G_c)f_c\mu_c + (1 - G_{pp})f_{pp}\mu_{pp}, \quad (2.55)$$

onde, G é a constante de emissão radiativa e o fator $(1 - G)$ é denominado fator de correção.

Conforme [Shultis e Faw, 2000], quando se considera apenas espalhamento Compton é adequada a utilização de μ_a , como na equação (2.52) como o coeficiente de absorção, desta forma, propõem-se nos capítulos seguintes a abordagem do cálculo da dose total, dose devido a radiação primária e do fator de buildup, considerando-se as definições aqui apresentadas, utilizando-se μ_a como coeficiente de absorção, onde μ_a é dado em cm^2/g .

3 ABORDAGENS DISCRETAS DA DEPENDÊNCIA ESPECTRAL

Uma vez que para se obter o cálculo de doses em radioterapia é necessário desenvolver-se soluções apropriadas para a equação de transporte de fótons, apresenta-se neste capítulo, três abordagens para o tratamento da variável que representa o comprimento de onda (energia) na equação de transporte para fótons com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina. Estas abordagens tratam a variável comprimento de onda de forma discretizada. Trataremos três casos: caso I - a abordagem inicial onde considera-se $\lambda \in [\lambda_0, \lambda_0 + 2]$, caso II - abordagem onde os limites do termo integral da equação são definidos de λ_0 até λ e caso III - abordagem de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ . Após o tratamento da variável comprimento de onda, em todas as situações, resolve-se a equação resultante, com relação a dependência angular (variável μ) utilizando o método analítico de ordenadas discretas (ADO) [Barichello e Siewert, 1999].

3.1 Caso I: $\lambda \in [\lambda_0, \lambda_0 + 2]$ - Abordagem inicial

Esta abordagem parte do problema conforme formulado em referências disponíveis na literatura, [Trindade, 1997], [Sauer, 1997], [Lunelli, 2002], [Rodrigues et al., 2006]. Desta forma considera-se a equação de transporte como,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ \times \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda', \quad (3.1) \end{aligned}$$

com condições de contorno em termos de uma distribuição incidente conhecida,

$$I(0, \lambda, \mu) = F_1(\lambda, \mu), \quad (3.2)$$

$$I(x_0, \lambda, \mu) = F_2(\lambda, \mu). \quad (3.3)$$

onde $x = 0$ e $x = x_0$ são as extremidades da placa.

Observa-se que o problema é restrito a uma pequena faixa de energia, $[\lambda_0, \lambda_0 + 2]$ que depende da energia do feixe incidente. Utilizam-se os resultados encontrados neste caso específico apenas como uma espécie de estudo preliminar e de validação computacional.

A discretização da variável de interesse leva ao uso de esquemas de quadratura numérica para o termo integral da equação. Nesta abordagem pode-se utilizar dois esquemas: quadratura de Gauss e método de Simpson.

3.1.1 Solução da integral em λ usando a quadratura de Gauss

Considera-se a situação de uma placa plana homogêna, de espessura x_0 e a equação (3.1), com condições de intensidade de radiação conhecida nas fronteiras da placa.

Para a aproximação da integral presente na equação (3.1) através da quadratura de Gauss, inicia-se fazendo a mudança de variável,

$$\lambda_* = \lambda - \lambda_0 - 1, \quad (3.4)$$

e aproxima-se a integral em λ'_* por quadratura de Gauss, para $\lambda_{*r} \in [-1, 1]$ pontos de quadratura e $w_r \in [-1, 1]$ pesos de quadratura, obtendo-se

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 K(\lambda'_* + \lambda_0 + 1, \lambda_* + \lambda_0 + 1) P_l(1 + \lambda'_* - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda'_*, \mu') d\mu' d\lambda'_* = \\ & = \sum_{r=1}^M K(\lambda'_{*r} + \lambda_0 + 1, \lambda_* + \lambda_0 + 1) P_l(1 + \lambda'_{*r} - \lambda_*) P_l(\mu) w_r \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda'_{*r}, \mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Assim, uma versão discreta da equação (3.1), que pode ser escrita para $j = 1, \dots, M$ como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_{*j}, \mu) + \sigma(\lambda_{*j}) I(x, \lambda_{*j}, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{r=1}^M K(\lambda_{*r} + \lambda_0 + 1, \lambda_{*j} + \lambda_0 + 1) \\ &\times P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) w_r \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_{*r}, \mu') d\mu', \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde M define o número de grupos de energia que estão associados à subdivisão do intervalo $[\lambda_0, \lambda_0 + 2]$, e $\lambda_{*r}, \lambda_{*j}$ são as raízes da quadratura em $[-1, 1]$ com pesos w_r associados.

A equação (3.6) pode ser escrita utilizando uma notação matricial, considerando,

$$K(\lambda_{*r} + \lambda_0 + 1, \lambda_{*j} + \lambda_0 + 1) \equiv K_{rj}, \quad r = 1, 2, \dots, M, \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (3.7)$$

$$I(x, \lambda_{*j}, \mu) \equiv I_j(x, \mu), \quad (3.8)$$

$$I(x, \lambda_{*r}, \mu) \equiv I_r(x, \mu), \quad (3.9)$$

de forma que

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{r=1}^M K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) w_r \\ \times \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') d\mu', \quad (3.10) \end{aligned}$$

onde $\sigma_j = \sigma(\lambda_{*j})$, $j = 1, 2, \dots, M$, representam os coeficientes de atenuação em $[cm^{-1}]$ para cada grupo de energia. Denota-se \mathbf{C}_l a matriz $M \times M$ com elementos

$$(C_l)_{i,j} = \alpha K_{ji} w_j P_l(1 + \lambda_{*j} - \lambda_{*i}) \quad i, j = 1, 2, \dots, M, \quad (3.11)$$

de onde a equação (3.10) pode ser escrita como

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}(x, \mu') d\mu' \quad (3.12)$$

para $x \in (0, x_0)$ e $\mu \in [-1, 1]$, onde $\mathbf{\Sigma}$ é a matriz diagonal com elementos $\sigma_j = \sigma(\lambda_{*j})$, $j = 1, 2, \dots, M$, e,

$$\mathbf{I}(x, \mu) = (I_1(x, \mu), I_2(x, \mu), \dots, I_M(x, \mu))^T \quad (3.13)$$

define o vetor $M \times 1$ com componentes $I(x, \lambda_{*j}, \mu)$.

As condições de contorno, representando radiação incidente conhecida no contorno da placa, são escritas na forma matricial como,

$$\mathbf{I}(0, \mu) = \mathbf{F}_1(\mu), \quad (3.14)$$

$$\mathbf{I}(x_0, -\mu) = \mathbf{F}_2(\mu), \quad (3.15)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

3.1.2 Solução da integral em λ usando a regra de Simpson

Outra abordagem da integral em λ pode ser feita através da regra de Simpson. A regra de Simpson ou regra do 1/3, segundo [Atkinson, 1988] é dada por,

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{\Delta}{3}[f(x_0) + f(x_n) + 4 \sum_{i=1, i \text{ ímpar}}^{m-1} f(x_j) + 2 \sum_{i=2, i \text{ par}}^{m-2} f(x_j)] \quad (3.16)$$

onde $m \in \mathbb{Z}$ é um número par de subintervalos,

$$\Delta = \frac{(b - a)}{m}, \quad (3.17)$$

$$x_r = a + k\Delta, \quad k = 1, 2, \dots, M. \quad (3.18)$$

Aplicando-se esta aproximação na equação (3.1) chega-se a

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) = \alpha \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r K_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') d\mu' \quad (3.19)$$

onde,

$$\Delta = \frac{2}{m}, \quad (3.20)$$

$$c_1 = c_{m+1} = 1, \quad (3.21)$$

$$c_r = \begin{cases} 4 & \text{se } r \text{ par} \\ 2 & \text{se } r \text{ ímpar,} \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\lambda_r = \lambda_0 + k\Delta, k = 1, 2, \dots, M, \quad (3.23)$$

para $m = M - 1$, em que m é o número par de subintervalos do intervalo $(\lambda_0, \lambda_0 + 2)$, e M é o número de grupos de energia considerado.

Novamente pode-se escrever a equação (3.19) em notação matricial, considerando a matriz \mathbf{C}_l de ordem $M \times M$ com elementos,

$$(C_l)_{i,j} = \alpha \frac{\Delta}{3} K(\lambda_j, \lambda_i) c_j P_l(1 + \lambda_j - \lambda_i), \quad i, j = 1, 2, \dots, M \quad (3.24)$$

de forma que,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}(x, \mu') d\mu', \quad (3.25)$$

para $x \in (0, x_0)$ e $\mu \in [-1, 1]$, onde $\mathbf{\Sigma}$ é a matriz diagonal com elementos $\sigma_j = \sigma(\lambda_j)$, $j = 1, 2, \dots, M$ e

$$\mathbf{I}(x, \mu) = (I_1(x, \mu), I_2(x, \mu), \dots, I_M(x, \mu))^T. \quad (3.26)$$

define o vetor $M \times 1$ com componentes $I(x, \lambda_{*j}, \mu)$.

Esta equação é similar à equação (3.12), e aqui define-se o problema com as mesmas condições de contorno,

$$\mathbf{I}(0, \mu) = \mathbf{F}_1(\mu), \quad (3.27)$$

$$\mathbf{I}(x_0, -\mu) = \mathbf{F}_2(\mu), \quad (3.28)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

3.1.3 Tratamento da variável angular pelo método de ordenadas discretas

O tratamento descrito na seção anterior, para a variável λ , resulta no problema que depende agora de duas variáveis: uma espacial e outra angular μ ,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \Sigma \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}(x, \mu') d\mu', \quad (3.29)$$

que pode ser resolvido pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO). Este método, utilizado desde 1999, [Barichello e Siewert, 1999] para problemas envolvendo transferência radiativa e gases rarefeitos, é perfeitamente aplicável a para problemas envolvendo vários grupos de energia [Siewert, 2000]. No tratamento da variável angular por este método alguns passos são comuns:

- Escrever a versão em ordenadas discretas, para o problema anterior, com base num esquema de quadratura num semi-intervalo;
- buscar soluções do tipo exponencial para a versão do problema escrito em ordenadas discretas;
- encontrar o problema de autovalores;
- encontrar uma expressão para os autovetores;

- encontrar a solução em ordenadas discretas usando as condições de contorno.

Desta forma, primeiramente faz-se uma mudança de variável para que a integral em (3.29) seja definida no semi-intervalo de 0 a 1,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \Sigma \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_0^1 P_l(\mu) [\mathbf{I}(x, \mu) + (-1)^l \mathbf{I}(x, -\mu)] d\mu, \quad (3.30)$$

e introduz-se um esquema de quadratura, considerando N pontos de quadratura $\{\mu_s\}$ e N pesos $\{w_s\}$ definidos no intervalo $[0, 1]$,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \Sigma \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N P_l(\mu_s) [\mathbf{I}(x, \mu_s) + (-1)^l \mathbf{I}(x, -\mu_s)] w_s. \quad (3.31)$$

Posteriormente, avalia-se a equação anterior nos pontos de quadratura $\pm\mu_i$, $i = 1, 2, \dots, N$,

$$\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{I}(x, \mu_i) + \Sigma \mathbf{I}(x, \mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \mathbf{I}_{l,s}(x) \quad (3.32)$$

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{I}(x, -\mu_i) + \Sigma \mathbf{I}(x, -\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \mathbf{I}_{l,s}(x) \quad (3.33)$$

onde se introduz a notação,

$$\mathbf{I}_{l,s}(x) = P_l(\mu_s) [\mathbf{I}(x, \mu_s) + (-1)^l \mathbf{I}(x, -\mu_s)]. \quad (3.34)$$

As expressões (3.32) e (3.33) claramente possuem solução exponencial. Assim substitue-se,

$$\mathbf{I}(x, \pm\mu_i) = \Phi(\nu, \pm\mu_i) e^{-x/\nu}, \quad (3.35)$$

onde ν é denominada constante de separação, e as funções $\Phi(\nu, \pm\mu_i)$ denotam o que chamamos de componentes independentes da parte espacial, resultando em,

$$\mu_i\left(-\frac{1}{\nu}\right)\Phi(\nu, \mu_i)e^{-x/\nu} + \Sigma\Phi(\nu, \mu_i)e^{-x/\nu} = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu)e^{-x/\nu}, \quad (3.36)$$

e

$$-\mu_i\left(-\frac{1}{\nu}\right)\Phi(\nu, -\mu_i)e^{-x/\nu} + \Sigma\Phi(\nu, -\mu_i)e^{-x/\nu} = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l(2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu)e^{-x/\nu}. \quad (3.37)$$

Simplificando $e^{-x/\nu}$ tem-se,

$$\left(\Sigma - \frac{\mu_i}{\nu}\hat{\mathbf{I}}\right)\Phi(\nu, \mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \quad (3.38)$$

$$\left(\Sigma + \frac{\mu_i}{\nu}\hat{\mathbf{I}}\right)\Phi(\nu, -\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l(2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \quad (3.39)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$, onde

$$\Phi_{l,s} = P_l(\mu_s)[\Phi(\nu, \mu_s) + (-1)^l\Phi(\nu, -\mu_s)], \quad (3.40)$$

e a expressão $\hat{\mathbf{I}}$ que aparece em (3.38) e (3.39) é a matriz identidade de ordem $M \times M$. Introduzindo-se os vetores de ordem MN ,

$$\Phi_+(\nu) = [\Phi^T(\nu, \mu_1), \Phi^T(\nu, \mu_2), \dots, \Phi^T(\nu, \mu_N)]^T \quad (3.41)$$

e

$$\mathbf{\Phi}_-(\nu) = [\mathbf{\Phi}^T(\nu, -\mu_1), \mathbf{\Phi}^T(\nu, -\mu_2), \dots, \mathbf{\Phi}^T(\nu, -\mu_N)]^T \quad (3.42)$$

onde T denota a operação transposta, e as matrizes de ordem $(MN \times MN)$,

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\dots, w_i \hat{\mathbf{I}}, \dots\}, \quad (3.43)$$

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\dots, \mu_i \hat{\mathbf{I}}, \dots\}, \quad (3.44)$$

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\dots, \Sigma, \dots\}, \quad (3.45)$$

e as matrizes de ordem $(MN \times M)$,

$$\mathbf{\Pi}_l = [P_l(\mu_1) \hat{\mathbf{I}}, P_l(\mu_2) \hat{\mathbf{I}}, \dots, P_l(\mu_N) \hat{\mathbf{I}}]^T, \quad (3.46)$$

as expressões (3.38) e (3.39) podem ser escritas como,

$$\left(\mathbf{D} - \frac{1}{\nu} \mathbf{M}\right) \mathbf{\Phi}_+(\nu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \quad (3.47)$$

$$\left(\mathbf{D} + \frac{1}{\nu} \mathbf{M}\right) \mathbf{\Phi}_-(\nu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \quad (3.48)$$

onde,

$$\mathbf{G}_l(\nu) = \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [\mathbf{\Phi}_+(\nu) + (-1)^l \mathbf{\Phi}_-(\nu)]. \quad (3.49)$$

Agora, chamando

$$U = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu), \quad (3.50)$$

$$V = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu), \quad (3.51)$$

fazendo a soma das equações (3.47) e (3.48) obtem-se,

$$\mathbf{E}\mathbf{X} = \frac{1}{\nu}\mathbf{Y}, \quad (3.52)$$

e, fazendo a diferença entre as equações (3.47) e (3.48),

$$\mathbf{H}\mathbf{Y} = \frac{1}{\nu}\mathbf{X}, \quad (3.53)$$

onde

$$\mathbf{E} = (\mathbf{D} - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l [1 + (-1)^l] \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W}) \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.54)$$

$$\mathbf{H} = (\mathbf{D} - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l [1 - (-1)^l] \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W}) \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.55)$$

$$\mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (3.56)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M}\mathbf{V}. \quad (3.57)$$

Utilizando as equações (3.52) e (3.53) obtem-se dois problemas de autovalores,

$$(\mathbf{HE})\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (3.58)$$

e

$$(\mathbf{EH})\mathbf{Y} = \lambda\mathbf{Y}, \quad (3.59)$$

onde $\lambda = \frac{1}{\nu^2}$. Assim λ_j são os autovalores dos problemas (3.58) e (3.59) e $\mathbf{X}(\lambda_j)$ e $\mathbf{Y}(\lambda_j)$ são os autovetores correspondentes.

Sejam λ_j os autovalores e $\mathbf{X}(\lambda_j)$ os autovetores, $j = 1, 2, \dots, MN$, então,

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\hat{\mathbf{I}} + \nu_j\mathbf{E})\mathbf{X}(\lambda_j) \quad (3.60)$$

e

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\hat{\mathbf{I}} - \nu_j\mathbf{E})\mathbf{X}(\lambda_j) \quad (3.61)$$

para $j = 1, 2, \dots, MN$. Na equação anterior $\hat{\mathbf{I}}$ denota a matriz identidade de ordem $MN \times MN$. Escrevendo as soluções das equações (3.32) e (3.33) na forma,

$$\mathbf{I}_+(x) = [\mathbf{I}^T(x, \mu_1), \mathbf{I}^T(x, \mu_2), \dots, \mathbf{I}^T(x, \mu_N)]^T, \quad (3.62)$$

$$\mathbf{I}_-(x) = [\mathbf{I}^T(x, -\mu_1), \mathbf{I}^T(x, -\mu_2), \dots, \mathbf{I}^T(x, -\mu_N)]^T, \quad (3.63)$$

a solução do problema homogêneo dado pelo equação (3.29) será

$$\mathbf{I}_+(x) = \sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_+(\nu_j) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_-(\nu_j) e^{-(x_0-x)/\nu_j}], \quad (3.64)$$

$$\mathbf{I}_-(x) = \sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_-(\nu_j) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_+(\nu_j) e^{-(x_0-x)/\nu_j}], \quad (3.65)$$

onde A_j e B_j são constantes determinadas impondo-se as condições de contorno,

$$\mathbf{I}_+(0) = \mathbf{F}_1(\mu), \quad (3.66)$$

$$\mathbf{I}_-(x_0) = \mathbf{F}_2(\mu), \quad (3.67)$$

ou seja, substitui-se as equações (3.64) (3.65) nas condições de contorno dadas pelas equações (3.66) e (3.67), obtendo-se o sistema de equações algébricas lineares,

$$\sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_+(\nu_j) + B_j \Phi_-(\nu_j) e^{-(x_0)/\nu_j}] = \mathbf{F}_1(\mu), \quad (3.68)$$

e

$$\sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_-(\nu_j) e^{-x_0/\nu_j} + B_j \Phi_+(\nu_j)] = \mathbf{F}_2(\mu). \quad (3.69)$$

Mostrando que a solução do problema (3.29) fica completamente determinada e depende apenas da posição x dada pelas equações (3.64) e (3.65).

3.1.4 Comparação dos resultados numéricos

A abordagem, considerando $\lambda \in [\lambda_0, \lambda_0 + 2]$, foi utilizada por [Trindade, 1997], [Sauer, 1997], [Lunelli, 2002] e [Rodrigues, 2007]. Desta forma, comparam-se os resultados obtidos pelo método ADO com os resultados numéricos obtidos por estes autores.

Em todas as situações considera-se espalhamento isotrópico, numa placa plana homogênea ou heterogênea, com condições de contorno fixas nas extremidades da placa. Na condição de contorno em $x = 0$ considera-se que há somente energia incidente E_0 , sendo que a intensidade de fluxo angular de energia incidente para qualquer outra energia é nula. Estabelece-se que no final da placa não há penetração de radiação com qualquer energia, ou seja, como condição de contorno considera-se que a intensidade de fluxo angular de energia incidente no final da placa é nula, conforme pode-se observar na figura seguinte, em termos do comprimento de onda λ ,

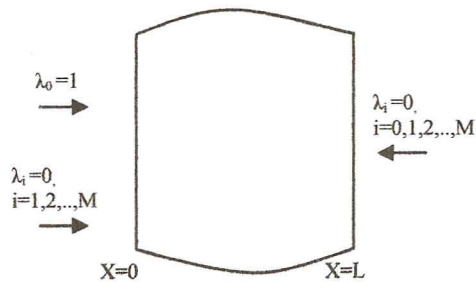


Figura 3.1 – Condições de contorno.

Os resultados aqui apresentados, para a dose e o fator de buildup, foram obtidos no sentido de validação numérica do método ADO para este tipo de problema e foram publicados e apresentados em congresso [Goldschmidt et al., 2008].

Conforme propõe [Trindade, 1997] e [Sauer, 1997] a dose total de energia é calculada por

$$D_T(x) = \sum_{i=0}^M \mu_{ai} E_i \hat{\Phi}(x, \lambda_i) \quad (3.70)$$

onde $\hat{\Phi}(x, \lambda_i)$ é o fluxo escalar definido como [Fano et al., 1959] e [Duderstadt e Martin, 1979],

$$\hat{\Phi}(x, \lambda_i) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda_i, \mu) d\mu \quad (3.71)$$

e $\mu_{ai} \equiv \mu_a(\lambda_i)$ é o coeficiente de absorção do meio material considerado (água, chumbo, etc) em cm^2/g para a energia E_i em MeV (Mega Eletron Volts), onde $E_i = \frac{0.511}{\lambda_i}$.

Para todos os problemas abordados, utilizam-se as seguintes condições de contorno,

$$I(0, \lambda_0, \mu) = 1, \quad \text{para } \mu > 0, \quad (3.72)$$

$$I(0, \lambda_i, \mu) = 0, \quad \text{para } \mu > 0, \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (3.73)$$

$$I(x_0, \lambda_i, \mu) = 0 \quad \text{para } \mu < 0, \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (3.74)$$

Comparam-se inicialmente os resultados obtidos na formulação LTP_9 , por [Trindade, 1997], calcula-se a taxa de dose total [$MeV/g.s$], para uma camada de água de 10 cm com energia incidente de 1 MeV e consideram-se oito grupos de energia e $N = 12$ para o método ADO. Para isto foi calculada a dose total em $x = 5$ cm e utilizada a quadratura de Gauss,

Tabela 3.1 – Dose total para 8 grupos de energia por quadratura de Gauss.

$D_T(x = 5cm)$	ADO	LTP_9
Gauss	0.016510	0.015969

Observa-se que utilizando $N \geq 12$ para a quadratura do método ADO, os valores apresentados acima não são alterados, mostrando a rápida convergência do método, sendo que leva-se menos de 5 segundos para gerar os resultados apresentados.

Ainda, comparando com [Trindade, 1997], calcula-se a taxa de dose total [$MeV/g.s$], utilizando dez grupos de energia e $N = 12$ para o método ADO, numa camada de água de 10 cm com uma energia incidente de 1MeV,

Tabela 3.2 – Dose total para 10 grupos de energia por quadratura de Gauss.

$D_T(x = 5cm)$	ADO	LTP_9
Gauss	0.015952	0.015444

Este resultado concorda em três casas decimais com o apresentado por [Trindade, 1997], utilizando o método LTP_9 , para o mesmo problema.

Observa-se assim, uma boa concordância com os resultados obtidos e apresentados por este autor. Ressalta-se que resultados para maiores valores de N não estavam disponíveis e que, de fato o uso da aproximação $N = 9$ no método LTP_N equivaleria a se usar $N = 10$ em um método de ordenadas discretas padrão. No caso do método ADO (onde os problemas de autovalores se reduzem à metade) seria equivalente a se usar (ordem par) aproximadamente $N = 4$ ou $N = 6$ e além disto destaca-se a eficiência do método ADO, uma vez que, aumentando o número de pontos de quadratura do método ADO observa-se convergência numérica dos resultados encontrados. Os resultados apresentados são para $N=12$ pontos de quadratura para o método ADO e resultam em 7 dígitos de convergência. A rápida convergência em relação ao baixo número de pontos de quadratura utilizados, deve-se basi-

camente ao esquema de quadratura no semi-intervalo, que implica num ganho de precisão em relação a outros esquemas de quadratura.

Considerando ainda meio homogêneo e comparando com [Lunelli, 2002], tem-se para a definição da dose total

$$D_T(\mu_0 x) = \sum_{i=0}^M \mu_{ai} \hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda_i) \quad (3.75)$$

onde $\mu_{ai} \equiv \mu_a(\lambda_i)$ é o coeficiente de absorção do meio material considerado, dado em $[cm^2/g]$ e $\hat{\Phi}(x, \lambda_i)$ é o fluxo escalar definido como [Duderstadt e Martin, 1979],

$$\hat{\Phi}(x, \lambda_i) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda_i, \mu) d\mu \quad (3.76)$$

A taxa de dose absorvida, devido somente ao fluxo incidente é dada por [Lunelli, 2002],

$$D_0(\mu_0 x) = \mu_{a0} \hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda_0) \quad (3.77)$$

onde λ_0 é o comprimento de onda da energia incidente E_0 e μ_{a0} é o coeficiente de absorção do meio material para a energia incidente.

Para este caso comparam-se os resultados para o fator de buildup definido por [Lunelli, 2002] como,

$$B(\mu_0 x) = \frac{D_T(\mu_0 x)}{D_0(\mu_0 x)}. \quad (3.78)$$

Na primeira situação, considera-se energia incidente de $1.25 Mev$ para água, com $N = 12$ pontos de quadratura para o método ADO. Utiliza-se cinco grupos de energia e aproxima-se a integral em λ utilizando a regra 1/3 de Simpson. Neste caso, os valores da espessura da placa estão em termos de livre caminho médio ($\mu_0 x$) em relação ao coeficiente de atenuação μ_0 da energia incidente de radiação, encontra-se para o fator de buildup,

Tabela 3.3 – Buildup para 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson.

$\mu_0 x$	(LTS_6)	ADO
1	1.95	1.91075
2	3.19	3.11051

Comparando também resultados, para o fator de buildup, para o meio considerado como chumbo, e utilizando $N = 20$ pontos de quadratura para o método ADO, com 1.25MeV de energia incidente,

Tabela 3.4 – Buildup para o chumbo com 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson.

$\mu_0 x$	(LTS_6)	ADO
1	1.84	1.81645
2	1.98	1.97884

Apresenta-se o cálculo do fator de buildup com apenas 4 pontos de quadratura para o método ADO, já que [Lunelli, 2002] usa 6 pontos para o método LTS_N . Assim obtém-se, para o chumbo, com 1.25MeV ,

Tabela 3.5 – Buildup para o chumbo com 5 grupos de energia por 1/3 de Simpson com 4 pontos de quadratura para ADO.

μx	(LTS_6)	ADO
1	1.84	1.81659
2	1.98	1.97829

Com 4 pontos de quadratura para o método ADO, o que seria aproximadamente equivalente a 6 pontos pelo método LTS_N observa-se uma concordância de dois dígitos significativos nos valores encontrados para o fator de buildup. Os resultados numéricos foram obtidos em menos de 5 segundos.

3.1.5 O problema heterogêneo

Autores como [Lunelli, 2002], [Rodrigues et al., 2006] e [Hirayama, 1998] apresentam resultados para o fator de buildup, para meios constituídos por dois ou mais materiais. O método ADO pode ser utilizado na abordagem de problemas heterogêneos. Para isto, o problema é resolvido considerando-se diversas regiões (placas), utilizando-se coeficientes de absorção e atenuação diferentes em cada região. São utilizadas então, condições de interface de continuidade entre os meios homogêneos.

De forma geral, representa-se um meio heterogêneo dividindo-o em m meios homogêneos de comprimento $(x_j - x_{j-1})$, $j = 1, 2, \dots, m$. Para cada um destes meios homogêneos j resolve-se o problema representado pela equação de transporte de partículas,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}^j(x, \mu) + \Sigma^j \mathbf{I}^j(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l^j \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}^j(x, \mu') d\mu', \quad (3.79)$$

onde $x \in (0, x_0)$ e $\mu \in [-1, 1]$, com matrizes Σ e \mathbf{C}_1 dadas como no caso homogêneo.

As condições de contorno são utilizadas como,

$$\mathbf{I}^1(0, \mu) = \mathbf{F}_1^1(\mu), \quad (3.80)$$

$$\mathbf{I}^m(x_0, -\mu) = \mathbf{F}_2^m(\mu), \quad (3.81)$$

para $\mu \in (0, 1]$, e as condições de interface de continuidade entre os meios homogêneos,

$$\mathbf{I}^j(x_j, \mu) = \mathbf{I}^{j+1}(x_j, \mu). \quad (3.82)$$

Utilizando a metodologia anterior, adequando-se a solução do sistema linear para a determinação dos coeficientes da solução geral, pode-se comparar os resultados para o fator de buildup para meio heterogêneo obtidos por [Lunelli, 2002]. Para isto, de forma análoga a este autor, consideram-se cinco grupos de energia com energia incidente de 1.25 Mev , abordagem

da integral em λ pela regra 1/3 de Simpson. Considera-se o meio formado por uma camada de água com espessura $\mu_0 x = 1$ seguida por uma camada de chumbo de espessuras $\mu_0 x = 1$, $\mu_0 x = 2$ e $\mu_0 x = 3$. A fórmula utilizada para o cálculo do fator de buildup é a mesma utilizada do caso homogêneo, equação (3.78).

Os valores apresentados mantêm-se constantes para $n \geq 20$ no método ADO,

Tabela 3.6 – Valores do Buildup para meio heterogêneo comparados com o método LTS_N .

$\mu_0 x$	ADO	LTS_6
1	2.18244	2.19
2	2.12769	2.12
3	2.10518	2.04

Apresenta-se também, a comparação para o fator de buildup usando $N=4$ para o método ADO, já que [Lunelli, 2002] usa $N=6$ no método LTS_N ,

Tabela 3.7 – Valores do Buildup para meio heterogêneo comparados com o método LTS_N , com quatro pontos para ADO.

$\mu_0 x$	ADO	LTS_6
1	2.18186	2.19
2	2.12651	2.12
3	2.01228	2.04

Verifica-se uma concordância, em no mínimo dois dígitos significativos, com os valores apresentados por [Lunelli, 2002], além de termos uma rápida convergência do método ADO, com a utilização de 20 ou mais pontos de quadratura para o método, seis dígitos permanecem inalterados, o que facilita a sua utilização. Apesar de seguirem a mesma definição de [Lunelli, 2002] para o cálculo do fator de buildup em meio heterogêneo, já validada nos

exemplos acima, não se obteve concordância com os resultados apresentados nas referências [Rodrigues et al., 2006] e [Rodrigues, 2007], para o fator de buildup em placas de comprimento maior do que $4mfp$. Nestas referências [Rodrigues et al., 2006] e [Rodrigues, 2007], os resultados são comparados com [Hirayama, 1995] e [Hirayama, 1998] que, no entanto, utilizam uma fórmula diferente para o cálculo do fator de buildup, da indicada pelos autores e mencionada acima.

3.2 Caso II: Abordagem de λ_0 até λ

Como vimos no capítulo 2, a equação de transporte de partículas para fótons, escrita em termos de comprimento de onda λ , considerando a intensidade de radiação e o núcleo de Klein-Nishina, pode ser preliminarmente escrita na forma,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ \times \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Também, conforme já observado no capítulo (2), devido à característica do espalhamento Compton, e de acordo com a definição do núcleo de Klein-Nishina o termo integral na equação (3.83) de fato tem limite inferior igual a λ_0 ou $\lambda - 2$ o que for maior, conforme destaca [Fano et al., 1959]. O caso considerando o máximo (Caso III), considerado mais adequado, será resolvido na seção (3.3). Neste momento, mesmo tratando-se de uma aproximação, que permite o uso de esquemas de quadratura mais tradicionais, trabalha-se com a integração de λ_0 até λ , $\lambda \in \mathbb{R}$.

Observa-se que o domínio de definição da variável λ é de $[\lambda_0, \infty)$. Desta forma, mapeia-se este intervalo $[\lambda_0, \infty)$ em $[-1, 1]$ para usar a quadratura de Gauss,

$$\lambda_j^* = -2e^{-\lambda_j + \lambda_0} + 1, \quad (3.84)$$

ou ainda,

$$\lambda_j = -\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda_j^* + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0 \quad j = 1, 2, \dots, M. \quad (3.85)$$

Uma vez discretizado, chega-se a uma equação na forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_j, \mu) + \sigma(\lambda_j) I(x, \lambda_j, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ &\times \int_{\lambda_0}^{\lambda_j} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_j) P_l(1 + \lambda' - \lambda_j) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda', \end{aligned} \quad (3.86)$$

onde, para $j = 1$ tem-se exatamente equação de transporte de partículas sem o termo de espalhamento, já que toda a expressão do lado direito será nula.

A expressão (3.86) deve ser avaliada em cada ponto de quadratura, para que se evite o aparecimento de incógnitas do lado direito que não estejam presentes do lado esquerdo da equação, optou-se por utilizar a regra dos trapézios para cada dois pontos, na avaliação das integrais em λ' da equação,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_j, \mu) + \sigma(\lambda_j) I(x, \lambda_j, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \left(\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_j) P_l(1 + \lambda' - \lambda_j) \right. \\ &P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' + \int_{\lambda_2}^{\lambda_3} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_j) P_l(1 + \lambda' - \lambda_j) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' + \dots + \\ &\left. \int_{\lambda_{j-1}}^{\lambda_j} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_j) P_l(1 + \lambda' - \lambda_j) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \right), \end{aligned} \quad (3.87)$$

para $j = 1, 2, \dots, M$, onde M é o número de grupos de energia considerado. Cada uma destas integrais foi resolvida utilizando a regra dos trapézios para dois pontos, de onde a equação (3.87) pode ser escrita como,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_1, \mu) + \sigma(\lambda_1) I(x, \lambda_1, \mu) = 0, \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_j, \mu) + \sigma(\lambda_j) I(x, \lambda_j, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{i=2}^j \frac{(\lambda_i - \lambda_{i-1})}{2} [K(\lambda_{i-1}, \lambda_j) \times \\ P_l(1 + \lambda_{i-1} - \lambda_j) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_{i-1}, \mu') d\mu' &+ K(\lambda_i, \lambda_j) P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_i, \mu') d\mu'], \\ j = 2, \dots, M. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Chamando,

$$K(\lambda_i, \lambda_j) P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) \equiv (K_{ij})_l, \quad (3.90)$$

$$I(x, \lambda_j, \mu) = I_j(x, \mu), \quad (3.91)$$

tem-se,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \sum_{i=2}^j \frac{(\lambda_i - \lambda_{i-1})}{2} [(K_{(i-1)j})_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \times \\ I_{i-1}(x, \mu') d\mu' &+ (K_{ij})_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_i(x, \mu') d\mu'], \quad j = 2, \dots, M. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Considerando \mathbf{C}_l , a matriz triangular inferior de ordem $M \times M$ dada por,

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{12})_l & \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{22})_l & 0 & \dots & 0 \\ \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{13})_l & \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{23})_l + \left(\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{2}\right)(K_{23})_l & \left(\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{2}\right)(K_{33})_l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{1M})_l & \left(\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{2}\right)(K_{2M})_l + \left(\frac{\lambda_3 - \lambda_2}{2}\right)(K_{2M})_l & \dots & \dots & \left(\frac{\lambda_M - \lambda_{M-1}}{2}\right)(K_{MM})_l \end{bmatrix}, \quad (3.93)$$

pode-se escrever a equação (3.92), utilizando a notação matricial,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}(x, \mu') d\mu', \quad (3.94)$$

para $x \in (0, x_0)$ e $\mu \in [-1, 1]$, onde $\boldsymbol{\Sigma}$ é a matriz diagonal com elementos $\sigma_j = \sigma(\lambda_j)$, $j = 1, 2, \dots, M$, \mathbf{C}_l é a matriz $M \times M$ dada anteriormente (triangular inferior) e,

$$\mathbf{I}(x, \mu) = (I_1(x, \mu), I_2(x, \mu), \dots, I_M(x, \mu))^T \quad (3.95)$$

define o vetor $M \times 1$ com componentes $I(x, \lambda_j, \mu)$.

Considera-se ainda, para o problema que tem sido tratado aqui, as condições de contorno escritas como,

$$\mathbf{I}(0, \mu) = \mathbf{F}_1(\mu), \quad (3.96)$$

$$\mathbf{I}(x_0, -\mu) = \mathbf{F}_2(\mu), \quad (3.97)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

A equação resultante é análoga a expressão obtida anteriormente, e que foi resolvida pelo método ADO na seção (3.1.3).

3.3 Caso III: Abordagem considerando $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ

Conforme já mencionado, rigorosamente, devido à característica do espalhamento Compton e ao núcleo de Klein-Nishina, a integração sobre λ' na equação (3.83) inicia-se em $\lambda - 2$ ou λ_0 o que for maior, conforme destaca [Fano et al., 1959]. Desta forma,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ &\times \int_{\max\{\lambda_0, \lambda-2\}}^{\lambda} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Observa-se que o termo integral em λ na equação (3.98) terá limites de integração

variáveis, o que dificulta a proposição de um esquema de quadratura adequado. Neste trabalho, a idéia inicial consiste em discretizar a variável λ , garantindo que o valor do $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ esteja entre estes valores, caso contrário resultaria um sistema com mais incógnitas do que equações.

Primeiramente, fixa-se um valor máximo para λ , denotado por λ_F , como aproximação do limite infinito, tal que,

$$\lambda_F = \lambda_0 + k, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (3.99)$$

Para calcular os valores de λ discretizados, considera-se espaçamento uniforme entre os pontos, definido por,

$$h = \frac{\lambda_F - \lambda_0}{n} \quad (3.100)$$

onde $\lambda_0 = \frac{0,511}{E_0}$ é um valor conhecido, e n é o número de intervalos considerados, $M = n + 1$ será o número de grupos de energia. Além disto, verifica-se pelas equações (3.99) e (3.100), que $k = nh$, onde $n \in \mathbb{N}$.

Desta forma, considerando que λ_0 é exatamente o primeiro valor da discretização, chamado neste caso de λ_1 , os demais valores para a discretização da variável energia são calculados como,

$$\lambda_i = \lambda_{i-1} + h, \quad i = 2, 3, \dots, M, \quad (3.101)$$

garantindo que $\max\{\lambda_1, \lambda_i - 2\}$, $i = 1, 2, \dots, M$ esteja sempre entre os valores de λ discretizados. Para cada λ_i , $i = 1, \dots, M$, resolve-se a equação de transporte,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ &\times \int_{\max\{\lambda_1, \lambda_i-2\}}^{\lambda_i} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_i) P_l(1 + \lambda' - \lambda_i) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \end{aligned} \quad (3.102)$$

A integral em λ' será resolvida pela regra dos trapézios. Chamando,

$$\max\{\lambda_1, \lambda_i - 2\} = \lambda_r \in \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M\}, \quad (3.103)$$

tem-se,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ &\times \int_{\lambda_r}^{\lambda_i} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda_i) P_l(1 + \lambda' - \lambda_i) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda', \end{aligned} \quad (3.104)$$

que pela regra dos trapézios pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \left(\frac{\lambda_i - \lambda_r}{2} \right) [K(\lambda_r, \lambda_i) P_l(1 + \lambda_r - \lambda_i) \times \\ &\int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_r, \mu') d\mu' + K(\lambda_i, \lambda_i) P_l(1 + \lambda_i - \lambda_i) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_i, \mu') d\mu'], \end{aligned} \quad (3.105)$$

onde λ_r é um valor fixo (para cada i) calculado como o máximo entre λ_1 e $\lambda_i - 2$.

Chamando

$$K(\lambda_r, \lambda_i) \equiv K_{ri}, \quad (3.106)$$

$$I(x, \lambda_i, \mu) = I_i(x, \mu), \quad (3.107)$$

e denotando por \mathbf{C}_l , a matriz de ordem $M \times M$ com coeficientes não nulos definidos por,

$$(C_l)_{i,r} = \frac{(\lambda_i - \lambda_r)}{2} K_{ri} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_i), \quad (3.108)$$

pode-se escrever a equação (3.105), utilizando a notação matricial,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{I}(x, \mu) + \mathbf{\Sigma} \mathbf{I}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{I}(x, \mu') d\mu', \quad (3.109)$$

para $x \in (0, x_0)$ e $\mu \in [-1, 1]$, onde $\mathbf{\Sigma}$ é a matriz diagonal com elementos $\sigma_i = \sigma(\lambda_i)$, $i = 1, 2, \dots, M$, e,

$$\mathbf{I}(x, \mu) = (I_1(x, \mu), I_2(x, \mu), \dots, I_M(x, \mu))^T, \quad (3.110)$$

define o vetor $M \times 1$ com componentes $I(x, \lambda, \mu)$.

O problema resultante é similar ao dos casos anteriores (casos I e II), onde o tratamento da variável angular é feito pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO), como apresentado na seção (3.1.3).

Simulações numéricas e validações com aproximações em meio infinito e semi-infinito, disponíveis na literatura, para as abordagens como considerado no caso II (λ_0 até λ) e III ($\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ) serão apresentados no capítulo seguinte.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS DA ABORDAGEM DISCRETA

Neste capítulo, apresentam-se os resultados numéricos obtidos pelos caso II - abordagens de λ_0 até λ e caso III - abordagem de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ .

Realizaram-se as implementações em FORTRAN, com a utilização do programa RG da coleção EISPACK, [Smith et al., 1976] para encontrar os autovalores e autovetores do problema e as subrotinas DGECCO e DGECL da coleção LINPACK [Dongarra et al., 1979], de forma a resolver o sistema linear resultante. Os resultados numéricos foram obtidos em um notebook Centrino Core 2 Duo com 1.73 Ghz. Para todas as situações abordadas consideram-se espalhamento isotrópico em uma placa plana, com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, vários grupos de energia e condições de contorno em termos de uma distribuição incidente conhecida.

4.1 O fator de buildup escrito em termos do comprimento de onda

Conforme [Shultis e Faw, 2000], fator de buildup $B(x)$ é definido como a razão da dose total em relação à dose não colidida,

$$B(x) = \frac{D_T(x)}{D_0(x)}, \quad (4.1)$$

onde [Goldstein, 1959] define

$$D_T(x) = \int_0^{E_0} \mu_a(E) \hat{\Phi}(x, E) dE, \quad (4.2)$$

e, $D_0(x)$ corresponde à dose devido ao fluxo não colidido $\hat{\Phi}(x, E_0)$, de onde tem-se,

$$B(x) = \frac{\int_0^{E_0} \mu_a(E) \hat{\Phi}(x, E) dE}{\int_0^{E_0} \mu_a(E_0) \hat{\Phi}(x, E_0) dE}, \quad (4.3)$$

e, o fluxo escalar $\hat{\Phi}(x, E)$ é definido em termos da intensidade de radiação, [Fano et al.,

1959], [Duderstadt e Martin, 1979],

$$\hat{\Phi}(x, E) = \int_{-1}^1 I(x, E, \mu) d\mu. \quad (4.4)$$

Em termos do comprimento de onda λ , as equações (4.2), (4.3) e (4.4) são reescritas, usando que $m_e c^2 = 0.511 \text{ Mev}$ e,

$$E = \frac{m_e c^2}{\lambda}, \quad (4.5)$$

de onde,

$$dE = -\frac{m_e c^2}{\lambda^2} d\lambda, \quad (4.6)$$

tem-se,

$$D_T(x) = \int_{\lambda_0}^{\infty} \mu_a(\lambda) \hat{\Phi}(x, \lambda) \frac{m_e c^2}{\lambda^2} d\lambda, \quad (4.7)$$

e,

$$B(x) = \frac{\int_{\lambda_0}^{\infty} \mu_a(\lambda) \hat{\Phi}(x, \lambda) \frac{m_e c^2}{\lambda^2} d\lambda}{\int_{\lambda_0}^{\infty} \mu_a(\lambda_0) \hat{\Phi}(x, \lambda_0) \frac{m_e c^2}{\lambda^2} d\lambda} \quad (4.8)$$

onde fluxo escalar $\hat{\Phi}(x, \lambda)$ é dado por,

$$\hat{\Phi}(x, \lambda) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda, \mu) d\mu. \quad (4.9)$$

O coeficiente de absorção $\mu_a(\lambda)$, em $[cm^2/g]$, pode ser considerado como o do meio em questão [Wood, 1982], [Blizard e Abbott, 1962], ou ainda como o coeficiente de absorção do ar [Hirayama, 1986], sendo que neste caso a expressão (4.8) é chamada de fator de buildup

de exposição.

De acordo com o capítulo (3), a equação de transporte para fótons foi resolvida para um problema homogêneo (o termo de fonte é nulo). Desta forma, os problemas abordados são de transporte de partículas numa placa plana considerando uma energia incidente E_0 na extremidade $x = 0$, para o primeiro comprimento de onda, e no final da placa a intensidade angular de energia é nula, (não há penetração de radiação com qualquer energia),

$$I(0, \lambda_0, \mu) = 1, \quad \text{para } \mu > 0, \quad (4.10)$$

$$I(0, \lambda_i, \mu) = 0, \quad \text{para } \mu > 0, \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (4.11)$$

$$I(\mu_0 x, \lambda_i, \mu) = 0 \quad \text{para } \mu < 0, \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (4.12)$$

Tendo em vista a maior dificuldade de soluções em meios finitos, os resultados numéricos apresentados por autores como [Blizard e Abbott, 1962], [Hirayama, 1986], [Fano et al., 1959], [Shultis e Faw, 2000], [Wood, 1982], são considerados em geral para meio infinito ou meio semi-infinito, considerando uma fonte, que pode ser pontual isotrópica, monoenergética, dentre outras, em geral a partir de abordagens como o método de Monte Carlo. O problema aqui abordado, pode ser considerado uma aproximação da componente não-singular de problemas onde fontes (formuladas em termos da função delta de Dirac) são propostas.

4.2 Resultados para o caso II - abordagem de λ_0 até λ

Para o cálculo da dose, primeiramente resolve-se a integral em λ que aparece na equação (4.7). Isto é feito através da quadratura de Gauss, utilizando o mapeamento exponencial,

$$\lambda^* = -2e^{-\lambda+\lambda_0} + 1, \quad (4.13)$$

de onde,

$$\lambda = -\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^* + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0, \quad (4.14)$$

e,

$$d\lambda = \frac{1}{1 - \lambda^*} d\lambda^*. \quad (4.15)$$

Assim, a dose total é escrita como,

$$D_T(x) = m_e c^2 \int_{-1}^1 \mu_a\left(-\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^* + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right) \hat{\Phi}\left(x, -\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^* + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right) \times \frac{1}{\left(-\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^* + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right)^2 (1 - \lambda^*)} d\lambda^*, \quad (4.16)$$

ou ainda, aproximando pela quadratura de Gauss,

$$D_T(x) = m_e c^2 \sum_{i=1}^M \mu_a\left(-\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^*(i) + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right) \hat{\Phi}\left(x, -\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^*(i) + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right) \times \frac{1}{\left(-\ln\left(-\frac{1}{2}\lambda^*(i) + \frac{1}{2}\right) + \lambda_0\right)^2 (1 - \lambda^*(i))} w(i), \quad (4.17)$$

onde $\lambda^*(i)$ são pontos de quadratura no intervalo $[-1, 1]$ e $w(i)$ são os pesos associados.

A expressão para $D_0(x)$ é conhecida como dose devido à radiação não colidida (primária), e representa a dose devido ao fluxo não colidido $\hat{\Phi}(x, \lambda_0)$, para o primeiro comprimento de onda λ_0 [Shultis e Faw, 2000].

Situação 1: Considere uma placa homogênea de água com energia incidente de 1Mev , determinam-se o fluxo escalar [fótons/ $\text{cm}^2 \cdot \text{s}$], a dose total e a dose devido à radiação primária [Mev/g.s], encontrados para diferentes espessuras da placa, expressa em livre caminho médio $\mu_0 x$, com $\mu_0 = 0.0706$, que é o valor do coeficiente de atenuação para a energia incidente de 1Mev . Na tabela (4.1), a 1ª coluna representa a espessura da placa, e os coeficientes de absorção $\mu_a(\lambda_i)$ são utilizados como os do ar, (apêndice I). Consideram-se 4 grupos de

energia, e $N = 20$ para o método ADO,

Tabela 4.1 – Fluxo escalar para quatro grupos de energia para o caso II.

mfp	$\Phi_1(x)$	$\Phi_2(x)$	$\Phi_3(x)$	$\Phi_4(x)$
1	0.135034	0.014884	0.013728	0.010492
2	0.031736	0.005029	0.004882	0.005547
3	0.008388	0.001564	0.001530	0.002075
4	0.002355	0.000478	0.000464	0.000690

Pode-se representar graficamente o fluxo escalar para os quatro grupos de energia, considerando uma placa de comprimento $3mfp$,

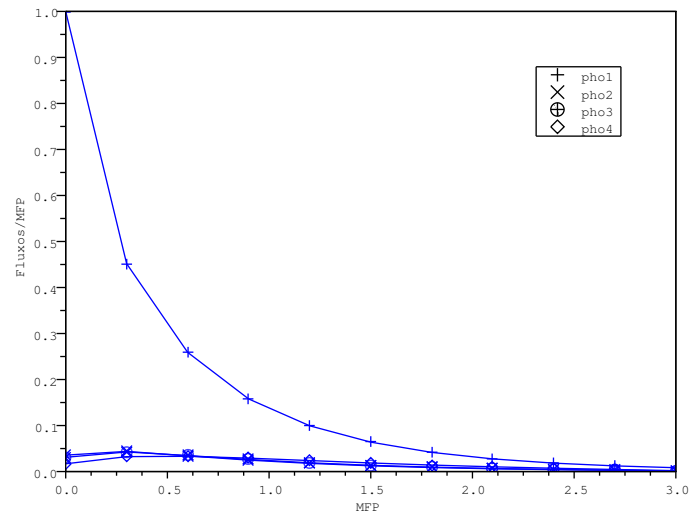


Figura 4.1 – Fluxos para uma placa de comprimento 3 MFP.

Para a dose total [Mev/g.s] e também dose devido a radiação primária, em termos da espessura da placa, para quatro grupos de energia,

Tabela 4.2 – Taxa de dose total e dose devido à radiação primária para 4 grupos de energia.

mfp	$D_T(x)$	$D_0(x)$
1	0.001318	0.001077
2	3.42×10^{-4}	2.53×10^{-4}
3	9.59×10^{-5}	6.69×10^{-5}
4	2.78×10^{-5}	1.87×10^{-5}

Cuja representação gráfica para uma placa de comprimento $3mfp$ será,

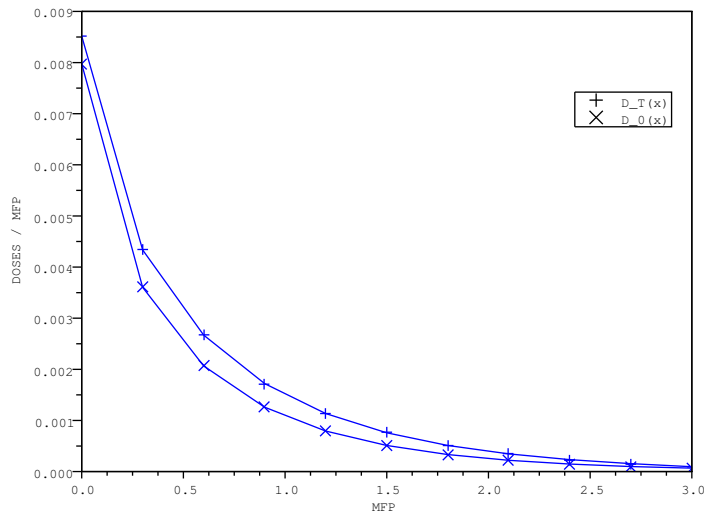


Figura 4.2 – Dose total e dose devido à radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP.

Situação 2: Considera-se uma placa plana homogênea de água, com energia incidente de 1Mev , determina-se o fator de buildup em função da espessura da placa, expressa em livre caminho médio, $\mu_0 x$. Os coeficientes de absorção $\mu_a(\lambda_i)$ são utilizados como os do ar (Apêndice I) e, consideram-se 4, 6, 8 e 10 grupos de energia, e $N = 20$ para o método ADO,

Tabela 4.3 – Fator de buildup para energia incidente de 1Mev em função do número de grupos de energia considerados.

mfp	Mg=4	Mg=6	Mg=8	Mg=10
1	1.224633	1.266277	1.274820	1.290762
2	1.353925	1.400368	1.421274	1.442572
3	1.434411	1.481729	1.516936	1.536542
4	1.481717	1.531839	1.581170	1.595969
5	1.507164	1.562498	1.624630	1.634217
6	1.518646	1.580692	1.653788	1.659104

Para a análise gráfica do comportamento do fator de buildup em função do número de energias considerado, com variação do comprimento da placa de $1mfp$ até $3mfp$, utiliza-

se uma placa de comprimento um pouco maior, neste caso de $3.5mfp$, como propõe [Shultis e Faw, 2000], [Hirayama, 1994b], [Wood, 1982] e [Fano et al., 1959],

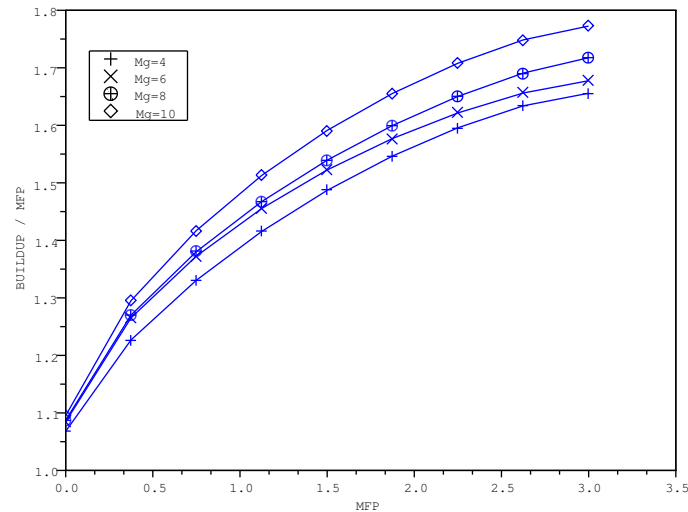


Figura 4.3 – Comparação entre os fatores de buildup em função do número de grupos de energia.

Situação 3: (Aumentando a energia incidente) Considera-se uma placa plana homogênea de água, com energia incidente de $2MeV$, com 4, 6, 8 e 10 grupos de energia e $N = 20$ para o método ADO. Neste caso $\mu_0 = 0.0493$ que é o coeficiente de atenuação para a energia incidente de $2MeV$, e os coeficientes de absorção são do ar. Determina-se o fator de buildup em função da espessura da placa, expressa em termos de livre caminho médio e do número de grupos de energia considerados,

Tabela 4.4 – Fator de buildup para energia incidente de $2MeV$ em função do número de grupos de energia considerados.

mfp	Mg=4	Mg=6	Mg=8	Mg=10
1	1.157172	1.187471	1.204685	1.223546
2	1.217954	1.256500	1.287438	1.316002
3	1.241087	1.287888	1.329174	1.364349
4	1.247210	1.301870	1.350934	1.391216

Situação 4: (Diminuindo a energia incidente)

Considera-se uma placa plana homogênea de água, com energia incidente de $0,6MeV$, com 4, 6, 8 e 10 grupos de energia e $N = 20$ para o método ADO. Neste caso $\mu_0 = 0.0896$ que é o coeficiente de atenuação para a energia incidente de $0,6MeV$, e os coeficientes de absorção são do ar. Determina-se o fator de buildup em função da espessura da placa, expressa em termos de livre caminho médio, e do número de grupos de energia considerados,

Tabela 4.5 – Fator de buildup para energia incidente de $0.6MeV$ em função do número de grupos de energia considerados.

mfp	Mg=4	Mg=6	Mg=8	Mg=10
1	1.282119	1.329999	1.334257	1.358298
2	1.479878	1.523225	1.554061	1.585111
3	1.632713	1.659969	1.724017	1.750901
4	1.747989	1.759768	1.8569346	1.872185

Para analisar o comportamento gráfico do fator de buildup em função da energia incidente, considera-se 10 grupos de energia, em uma placa de comprimento $3.5mfp$ com variação de $1mfp$ até $3mfp$,

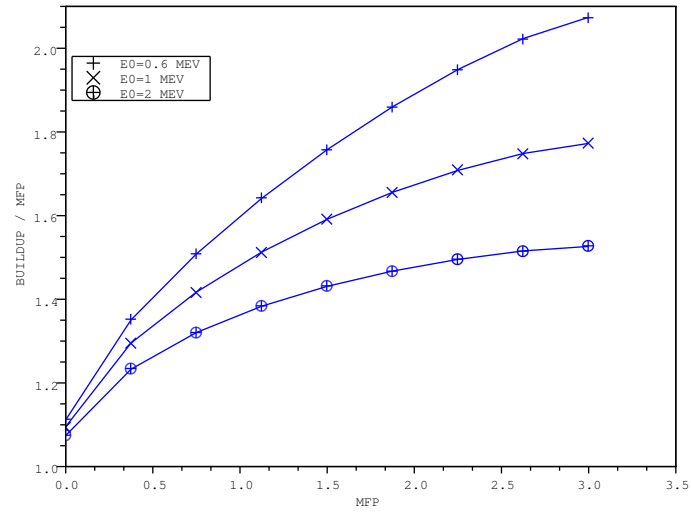


Figura 4.4 – Fatores de buildup em função da energia incidente.

Observa-se que, quando aumentamos a energia incidente, diminuímos o valor do buildup. Este comportamento gráfico é o mesmo apresentado por [Blizard e Abbott, 1962], conforme pode-se observar na figura (4.5),

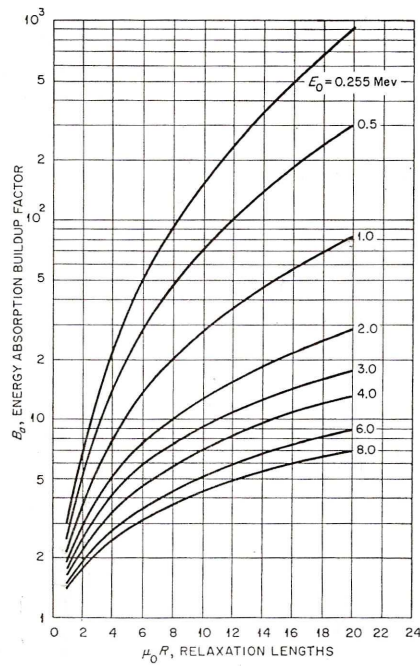


Figura 4.5 – Fator de buildup para água, [Blizard e Abbott, 1962].

Novamente, os valores apresentados por este autor são para meio infinito e com a utilização de uma fonte pontual isotrópica. Segundo [Blizard e Abbott, 1962] as condições de contorno introduzidas na placa possuem o efeito de reduzir o fluxo próximo à superfície, quando comparado com o fluxo em um meio infinito na mesma distância da fonte. Esta redução é causada pela fuga ou “leakage” dos raios gama da superfície da placa, que desta forma não contribuem para o fluxo após o espalhamento, ou seja, temos um aumento na taxa de perda e diminuição na taxa de produção.

Observa-se, na tabela seguinte, a comparação de valores encontrados para o fator de buildup com valores apresentados por [Blizard e Abbott, 1962]. Consideram-se neste caso 10 grupos de energia para água com energia incidente de $1MeV$ e coeficientes de absorção do ar,

Tabela 4.6 – Fator de buildup para energia incidente de $1MeV$.

mfp	ADO	Monte Carlo
1	1.290762	1.78
2	1.442572	2.62
4	1.595969	4.95

Destaca-se, que existe um erro estimado de 15% nos resultados apresentados por [Blizard e Abbott, 1962], e estes são estimados pelo método de Monte Carlo, como uma aproximação para a placa, utilizando-se meio infinito e fonte pontual isotrópica. Não existe referência à quantidade de grupos de energia utilizados. Muitos resultados para placa são dados a partir de problemas em meio semi-infinito definindo a espessura da placa um valor inferior.

Apresenta-se na tabela seguinte a convergência numérica do fator de buildup para água, com energia incidente de $1MeV$ e 10 grupos de energia, em função do número de pontos de quadratura considerados para o método ADO,

Tabela 4.7 – Convergência numérica do método ADO, considerando a abordagem do caso II.

N	$3mfp$
2	1.52895895
4	1.53560968
6	1.53652832
8	1.53654543
10	1.53654165
12	1.53654225
14	1.53654227
16	1.53654231

Como observa-se na tabela (4.7) com $N = 12$ obtém-se a concordância de em seis dígitos significativos.

4.3 Resultados para o caso III - $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ

Neste caso, considera-se a dose calculada até um valor λ_F (maior valor de comprimento de onda considerado), assim a equação para a dose (4.7) é reescrita como,

$$D_T(x) = m_e c^2 \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mu_a(\lambda) \hat{\Phi}(x, \lambda) \frac{1}{\lambda^2} d\lambda, \quad (4.18)$$

onde aproxima-se a integral em λ pela regra dos trapézios repetida, dividindo o intervalo de $[\lambda_0, \lambda_F]$ em $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_M$,

$$D_T(x) = m_e c^2 \frac{h}{2} \left[\mu_a(\lambda_1) \hat{\Phi}(x, \lambda_1) \frac{1}{\lambda_1^2} + 2\mu_a(\lambda_2) \hat{\Phi}(x, \lambda_2) \frac{1}{\lambda_2^2} + 2\mu_a(\lambda_3) \hat{\Phi}(x, \lambda_3) \frac{1}{\lambda_3^2} + \dots + 2\mu_a(\lambda_{M-1}) \hat{\Phi}(x, \lambda_{M-1}) \frac{1}{\lambda_{M-1}^2} + \mu_a(\lambda_M) \hat{\Phi}(x, \lambda_M) \frac{1}{\lambda_M^2} \right], \quad (4.19)$$

onde $h = \frac{\lambda_{(i)} - \lambda_{(i-1)}}{2}$ e, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M$ são pontos de discretização da variável λ , garantindo que $\max\{\lambda_{(1)}, \lambda_{(i)} - 2\}$, $i = 1, 2, \dots, M$ esteja entre os valores de λ discretizados.

Aqui é interessante destacar que, a critério de comparação com o caso anterior, necessita-se verificar qual o intervalo de energia considerado. No caso anterior, o intervalo de energia é completamente determinado pelo número de pontos de discretização da variável λ , que representavam o número de grupos de energia considerados, quanto mais grupos de energia maior o intervalo de λ considerado. No caso atual, estipula-se o valor de λ_F que é valor máximo que se pretende obter, e a partir disto divide-se o intervalo de λ_0 até λ_F em um número de grupos de energia, sendo que neste caso o número de grupos de energia corresponde à quantidade de discretizações consideradas no intervalo de λ_0 até λ_F .

Situação 1: Considera-se uma placa plana homogênea de água, com energia incidente de 1Mev e λ_F igual a 3.511, sete grupos de energia para a discretização da variável comprimento de onda e $N = 20$ para o método ADO. Determina-se a dose total [Mev/g.s] e dose devido a radiação primária [Mev/g.s] e o fator de buildup,

Tabela 4.8 – Taxa de dose total e dose devido a radiação primária para a abordagem do caso III.

mfp	$D_T(x)$	$D_0(x)$
1	0.002754	0.002049
2	8.66×10^{-4}	5.18×10^{-4}
3	2.98×10^{-4}	1.46×10^{-4}
4	1.07×10^{-4}	4.41×10^{-5}

O comportamento gráfico da dose total e dose devido a radiação primária, para uma placa plana de comprimento $3mfp$, pode ser observado na figura seguinte,

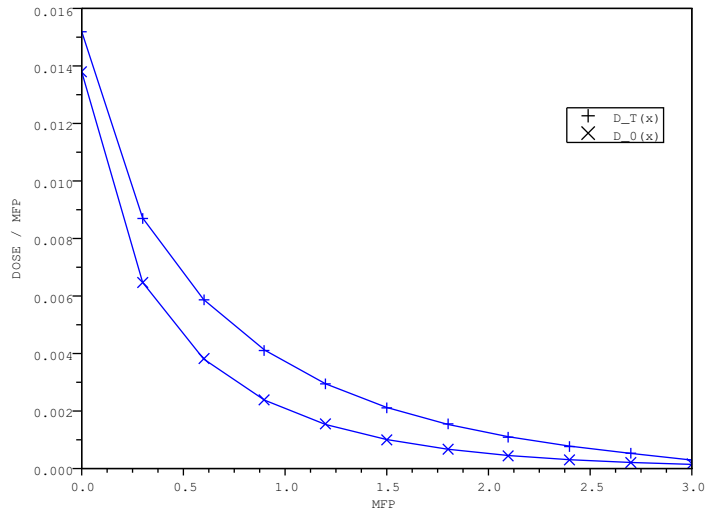


Figura 4.6 – Dose total e dose devido à radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP pela abordagem do caso III.

Este caso pode ser comparado com a metodologia anterior, ao de quatro grupos de energia, em que o valor máximo para λ é aproximadamente 3.18. Pode-se observar que nas duas metodologias o comportamento gráfico das doses não é alterado. O fator de buildup, em termos de espessura da placa, para as duas metodologias é apresentado na tabela seguinte,

Tabela 4.9 – Comparação do fator de buildup para as duas metodologias.

mfp	Caso II	Caso III
1	1.224633	1.343796
2	1.353925	1.672099
3	1.434411	2.030181
4	1.481717	2.439942

Observa-se uma diferença entre os valores encontrados pelas duas metodologias, que se acredita ocorrer principalmente pelo fato de que a abordagem do caso II não inclui os extremos do intervalo, enquanto a abordagem do caso III inclui os extremos do intervalo,

além de considerar a integral iniciando no valor correto de comprimento de onda.

Na tabela seguinte apresenta-se a análise da convergência numérica para esta abordagem, considerando-se o meio como água, com energia incidente de 1Mev e sete grupos de energia, para uma placa de comprimento $1mfp$, em função do número de pontos de quadratura considerados para o método ADO,

Tabela 4.10 – Convergência numérica do método ADO, considerando a abordagem do caso III.

N	$1mfp$
6	1.34515888
8	1.34397212
10	1.34389860
12	1.34385587
14	1.34383203
16	1.34381578
20	1.34379670
22	1.34379077
24	1.34378624
28	1.34377990

Como observa-se na tabela (4.10) com $N = 20$ obtém-se a concordância de em quatro dígitos significativos, o que caracteriza a rápida convergência numérica do método.

Situação 2: (Mudando o meio)

Considera-se uma placa plana homogênea de chumbo, com energia incidente de 1Mev , determina-se a dose total [Mev/g.s] e dose devido a radiação primária [Mev/g.s]. Neste caso $\mu_0 = 0.77634\text{ cm}^{-1}$ que é o coeficiente de atenuação do chumbo para a energia incidente de 1Mev . Considera-se nove grupos de energia, com valor máximo para $\lambda_F = 4.511$ e, $N = 20$ para o método ADO,

Tabela 4.11 – Dose total e dose devido a radiação primária para o chumbo pelo caso III.

mfp	$D_T(x)$	$D_0(x)$
1	0.002510	0.002068
2	5.79×10^{-4}	5.21×10^{-4}
3	1.58×10^{-4}	1.47×10^{-4}
4	6.26×10^{-5}	5.88×10^{-5}

O comportamento gráfico das doses, pode ser observado na figura seguinte, considerando-se uma placa comprimento $3mfp$,

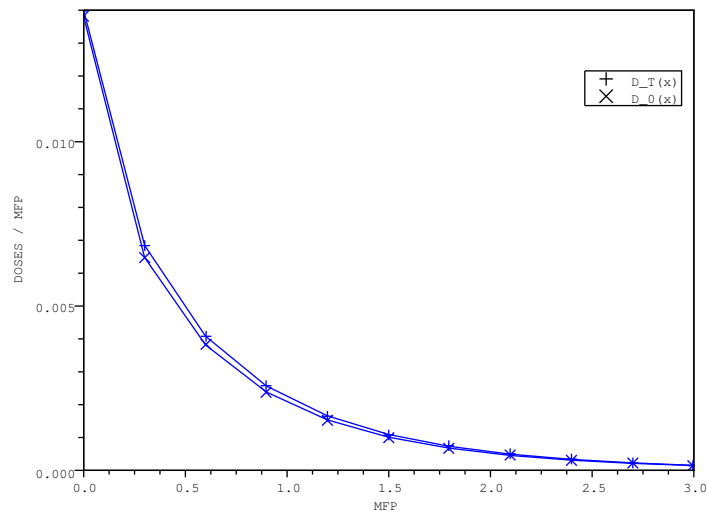


Figura 4.7 – Dose total e devido a radiação primária, para o chumbo numa placa de comprimento 3 MFP

Novamente, observa-se o comportamento gráfico característico apresentado nas outras metodologias.

5 ABORDAGEM CONTÍNUA DA DEPENDÊNCIA ESPECTRAL

Neste capítulo se apresenta uma abordagem contínua para o tratamento da variável λ do problema de transporte de radiação para fótons, com dependência espectral. Para tanto considera-se, como nos capítulos anteriores, a equação de transporte para fótons, homogênea, dependente do comprimento de onda λ ,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ \times \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \end{aligned} \quad (5.1)$$

sendo que o núcleo de espalhamento $K(\lambda', \lambda)$ conhecido como de Klein-Nishina é dado na equação (2.46), para espalhamento Compton. As condições de contorno são definidas como anteriormente, em termos de uma distribuição incidente conhecida,

$$I(0, \lambda, \mu) = F_1(\lambda, \mu), \quad (5.2)$$

$$I(x_0, \lambda, \mu) = F_2(\lambda, \mu), \quad (5.3)$$

onde $x = 0$ e $x = x_0$ são as extremidades da placa.

Seguindo uma abordagem espectral, a solução é proposta na forma de uma expansão truncada em termos de funções conhecidas, neste caso, polinômios de Legendre. Expansões semelhantes também foram utilizadas por [Siewert, 2003a], [Siewert, 2003b] na solução de vários problemas na dinâmica de gases rarefeitos. Aqui aproxima-se o intervalo $[\lambda_0, \infty)$ por um intervalo do tipo $[\lambda_0, \lambda_F]$,

$$I(x, \lambda, \mu) = \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) g_m(x, \mu) \quad (5.4)$$

onde as funções $g_m(x, \mu)$ serão posteriormente determinadas e P_m representam os polinômios de Legendre. As expressões λ_0 e λ_F são, respectivamente, os comprimentos de onda para a energia incidente e comprimento de onda máximo considerado.

Substituindo a expressão (5.4) na equação (5.1) tem-se,

$$\begin{aligned} & \mu \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) \frac{\partial}{\partial x} g_m(x, \mu) + \sigma(\lambda) \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) g_m(x, \mu) \\ &= \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \int_{-1}^1 K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu') \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) \\ & \quad \times g_m(x, \mu') d\mu' d\lambda'. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Multiplicando a expressão anterior por

$$W_i(\lambda) = P_i\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right), \quad i = 0, 1, 2, 3, \dots, M, \quad (5.6)$$

e, integrando em λ no intervalo $[\lambda_0, \lambda_F]$, onde λ_F é um valor fixo, pré-determinado e grande o suficiente,

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial g_m(x, \mu)}{\partial x} \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) P_i\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) d\lambda + \\ & \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) P_i\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) \sigma(\lambda) d\lambda = \alpha \sum_{m=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ & \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \int_{\lambda_0}^{\lambda} K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) P_i\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) \\ & \quad \times d\lambda' d\lambda \int_{-1}^1 P_l(\mu') g_m(x, \mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Chamando $\mathbf{G}(x, \mu)$ o vetor de dimensão $(M+1)$ com componentes $g_m(x, \mu)$, $m = 0, 1, \dots, M$, escreve-se na forma matricial,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{A} \mathbf{G}(x, \mu) + \mathbf{S} \mathbf{G}(x, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \mathbf{B}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{G}(x, \mu') d\mu', \quad (5.8)$$

onde as constantes de ordem $(M + 1) \times (M + 1)$ são dadas por,

$$\mathbf{A} = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mathbf{P}^T(\lambda) \mathbf{P}(\lambda) d\lambda, \quad (5.9)$$

$$\mathbf{S} = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mathbf{P}^T(\lambda) \mathbf{P}(\lambda) \sigma(\lambda) d\lambda, \quad (5.10)$$

$$\mathbf{B}_l = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \int_{\lambda_0}^{\lambda} K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) \mathbf{P}^T(\lambda') \mathbf{P}(\lambda) d\lambda' d\lambda, \quad (5.11)$$

e

$$\mathbf{P}(\lambda) = [P_0(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}), P_1(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}), \dots, P_M(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F})] \quad (5.12)$$

é um vetor de dimensão $(M + 1)$, sendo que o subscrito T que aparece nas equações (5.9), (5.10) e (5.11), representa o vetor transposto.

A matriz A obtida, é invertível, assim multiplicando a expressão (5.8) por A^{-1} , tem-se,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{G}(x, \mu) + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{G}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l + 1) P_l(\mu) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{G}(x, \mu') d\mu'. \quad (5.13)$$

Chamando $\mathbf{R} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{S}$ e $\mathbf{C}_l = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_l$ tem-se como nos casos da abordagem discreta, o seguinte problema a ser resolvido,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{G}(x, \mu) + \mathbf{R} \mathbf{G}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l + 1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{G}(x, \mu') d\mu'. \quad (5.14)$$

onde $\mathbf{G}(x, \mu) = (g_0(x, \mu), g_1(x, \mu), g_2(x, \mu), \dots, g_m(x, \mu))$.

5.1 Condições de contorno

O procedimento anterior deve ser aplicado analogamente nas condições de contorno. Para isto considera-se,

$$I(0, \lambda, \mu) = F_1(\lambda, \mu), \quad (5.15)$$

$$I(x_0, \lambda, \mu) = F_2(\lambda, \mu), \quad (5.16)$$

onde substitui-se a expressão,

$$I(x, \lambda, \mu) = \sum_{m=0}^M P_m \left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F} \right) g_m(x, \mu), \quad (5.17)$$

e tem-se,

$$\sum_{m=0}^M P_m \left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F} \right) g_m(0, \mu) = F_1(\lambda, \mu), \quad (5.18)$$

e

$$\sum_{m=0}^M P_m \left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F} \right) g_m(x_0, \mu) = F_2(\lambda, \mu). \quad (5.19)$$

Multiplicando por,

$$W_i(\lambda) = P_i \left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F} \right), \quad i = 0, 1, 2, \dots, M, \quad (5.20)$$

e, integrando de λ_0 à λ_F , chega-se a

$$\mathbf{AG}(0, \mu) = \mathbf{T}_1(\mu), \quad (5.21)$$

$$\mathbf{F}\mathbf{G}(x_0, \mu) = \mathbf{T}_2(\mu), \quad (5.22)$$

onde

$$\mathbf{A} = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mathbf{P}^T(\lambda)\mathbf{P}(\lambda)d\lambda, \quad (5.23)$$

$$\mathbf{T}_1(\mu) = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mathbf{P}^T(\lambda)F_1(\lambda, \mu)d\lambda, \quad (5.24)$$

$$\mathbf{T}_2(\mu) = \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mathbf{P}^T(\lambda)F_2(\lambda, \mu)d\lambda. \quad (5.25)$$

Multiplicando as condições de contorno pela matriz \mathbf{A}^{-1} tem-se:

$$\mathbf{G}(0, \mu) = \mathbf{Q}_1(\mu), \quad (5.26)$$

$$\mathbf{G}(x_0, \mu) = \mathbf{Q}_2(\mu), \quad (5.27)$$

onde $\mathbf{Q}_1(\mu) = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{T}_1(\mu)$ e $\mathbf{Q}_2(\mu) = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{T}_2(\mu)$.

Finalmente, chega-se ao seguinte problema reformulado,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{G}(x, \mu) + \mathbf{R}\mathbf{G}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{G}(x, \mu') d\mu' \quad (5.28)$$

com as seguintes condições de contorno,

$$\mathbf{G}(0, \mu) = \mathbf{Q}_1(\mu), \quad (5.29)$$

$$\mathbf{G}(x_0, \mu) = \mathbf{Q}_2(\mu), \quad (5.30)$$

onde

$$\mathbf{G}(x, \mu) = (g_0(x, \mu), g_1(x, \mu), \dots, g_m(x, \mu)), \quad (5.31)$$

determina os coeficientes de expansão.

5.2 Expressões para as matrizes \mathbf{A} , \mathbf{S} e \mathbf{B}_l :

Na resolução analítica do problema, primeiramente, encontram-se expressões para as matrizes que aparecem no problema (5.28). Para isto utiliza-se que

$$\lambda_0 = \frac{0.511MeV}{E_0}, \quad (5.32)$$

e λ_F é um valor máximo para λ , pré-fixado. Nos casos anteriores (caso I, caso II e caso III), os valores da matriz \mathbf{R} foram obtidos a partir de dados tabelados para os coeficientes σ_j e \mathbf{B}_l é a matriz contendo o núcleo de espalhamento, calculado em pontos discretizados. Neste caso, as expressões (5.9), (5.10), (5.11) podem ser determinadas analiticamente através do software Maple. Cada expressão representa uma matriz de ordem $(M + 1) \times (M + 1)$, com elementos definidos em termos de integrais. Estas integrais são perfeitamente determinadas no Maple. Para a matriz (5.9) tem-se integrais envolvendo polinômios de Legendre. Para a matriz (5.10) tem-se integrais envolvendo polinômios de Legendre multiplicados pela função $\sigma(\lambda)$, que neste caso é obtida analiticamente por interpolação.

Para as matrizes (5.11) integra-se de λ_0 até λ , utilizando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e após integra-se novamente de λ_0 até um determinado valor fixo λ_F . O tratamento analítico, possível para o núcleo de Klein-Nishina, é uma das grandes vantagens desta abordagem em relação às abordagens discretas. Para se obter as matrizes \mathbf{R} e \mathbf{C}_l calcula-se analiticamente a matriz inversa \mathbf{A}^{-1} , assim obtém-se, $\mathbf{R} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{S}$ e $\mathbf{C}_l = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}_l$.

Este cálculo depende exclusivamente do intervalo de integração.

Assim, as expressões para as matrizes ficam completamente determinadas e possuem solução analítica obtida no Maple.

5.3 Solução analítica por ordenadas discretas

Resolve-se agora o problema (5.28), através do método de ordenadas discretas da mesma forma como os problemas resultantes do Capítulo 3. Neste caso, diferentemente dos casos anteriores, os coeficientes de entrada são matrizes de ordem $(M + 1) \times (M + 1)$, contendo termos integrais envolvendo a multiplicação de polinômios de Legendre. A matriz \mathbf{C}_l contém o núcleo de espalhamento, que neste caso é analisado analiticamente.

Apresenta-se, novamente o método analítico de ordenadas discretas (ADO), com as alterações destacadas acima. Para isto considera-se o esquema de quadratura no intervalo $[0,1]$, para resolver a equação

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{G}(x, \mu) + \mathbf{R} \mathbf{G}(x, \mu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l + 1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \mathbf{G}(x, \mu') d\mu', \quad (5.33)$$

com as condições de contorno,

$$\mathbf{G}(0, \mu) = \mathbf{Q}_1(\mu), \quad (5.34)$$

$$\mathbf{G}(x_0, \mu) = \mathbf{Q}_2(\mu). \quad (5.35)$$

Em termos de ordenadas discretas pode-se escrever

$$\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{G}(x, \mu_i) + \mathbf{R} \mathbf{G}(x, \mu_i) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l + 1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \mathbf{G}_{l,s}(x), \quad (5.36)$$

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{G}(x, -\mu_i) + \mathbf{R} \mathbf{G}(x, -\mu_i) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l + 1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \mathbf{G}_{l,s}(x), \quad (5.37)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$, onde introduz-se a notação,

$$\mathbf{G}_{l,s}(x) = P_l(\mu_s)[\mathbf{G}(x, \mu_s) + (-1)^l \mathbf{G}(x, -\mu_s)], \quad (5.38)$$

considerando N pontos de quadratura $\{\mu_s\}$ e N pesos $\{w_s\}$ definidos no intervalo $[0, 1]$.

As expressões (5.36) e (5.42) possuem solução exponencial, assim,

$$\mathbf{G}(x, \pm\mu_i) = \Phi(\nu, \pm\mu_i)e^{-x/\nu}, \quad (5.39)$$

de onde tem-se,

$$\mu_i\left(-\frac{1}{\nu}\right)\Phi(\nu, \mu_i)e^{-x/\nu} + \mathbf{R}\Phi(\nu, \mu_i)e^{-x/\nu} = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu)e^{-x/\nu}, \quad (5.40)$$

e,

$$-\mu_i\left(-\frac{1}{\nu}\right)\Phi(\nu, -\mu_i)e^{-x/\nu} + \mathbf{R}\Phi(\nu, -\mu_i)e^{-x/\nu} = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu)e^{-x/\nu}. \quad (5.41)$$

Simplificando $e^{-x/\nu}$ tem-se,

$$\left(\Sigma - \frac{\mu_i \hat{\mathbf{I}}}{\nu}\right)\Phi(\nu, \mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \quad (5.42)$$

$$\left(\Sigma + \frac{\mu_i \hat{\mathbf{I}}}{\nu}\right)\Phi(\nu, -\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1)P_l(\mu_i)\mathbf{C}_l \sum_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \quad (5.43)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$, onde

$$\Phi_{l,s} = P_l(\mu_s)[\Phi(\nu, \mu_s) + (-1)^l \Phi(\nu, -\mu_s)], \quad (5.44)$$

e a expressão $\hat{\mathbf{I}}$ que aparece em (5.42) e (5.43) é a matriz identidade de ordem $(M + 1) \times (M + 1)$. Introduce-se os vetores de ordem $(M + 1)N$,

$$\Phi_+(\nu) = [\Phi^T(\nu, \mu_1), \Phi^T(\nu, \mu_2), \dots, \Phi^T(\nu, \mu_N)]^T, \quad (5.45)$$

e,

$$\Phi_-(\nu) = [\Phi^T(\nu, -\mu_1), \Phi^T(\nu, -\mu_2), \dots, \Phi^T(\nu, -\mu_N)]^T, \quad (5.46)$$

onde T denota a operação transposta, e considera-se as matrizes de ordem $((M + 1)N \times (M + 1)N)$,

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\dots, w_i \hat{\mathbf{I}}, \dots\}, \quad (5.47)$$

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\dots, \mu_i \hat{\mathbf{I}}, \dots\}, \quad (5.48)$$

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\dots, \mathbf{R}, \dots\}, \quad (5.49)$$

e as matrizes de ordem $((M + 1)N \times (M + 1))$,

$$\mathbf{\Pi}_l = [P_l(\mu_1) \hat{\mathbf{I}}, P_l(\mu_2) \hat{\mathbf{I}}, \dots, P_l(\mu_N) \hat{\mathbf{I}}]^T, \quad (5.50)$$

as expressões (5.42) e (5.43) podem ser escritas como,

$$(\mathbf{D} - \frac{1}{\nu} \mathbf{M}) \Phi_+(\nu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l + 1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \quad (5.51)$$

$$(\mathbf{D} + \frac{1}{\nu}\mathbf{M})\Phi_+(\nu) = \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \quad (5.52)$$

onde

$$\mathbf{G}_l(\nu) = \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [\Phi_+(\nu) + (-1)^l \Phi_-(\nu)]. \quad (5.53)$$

Sejam,

$$U = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu), \quad (5.54)$$

$$V = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu), \quad (5.55)$$

fazendo a soma das equações (5.51) e (5.52),

$$\mathbf{E}\mathbf{X} = \frac{1}{\nu}\mathbf{Y}, \quad (5.56)$$

e, fazendo a diferença entre as equações (5.51) e (5.52),

$$\mathbf{H}\mathbf{Y} = \frac{1}{\nu}\mathbf{X}, \quad (5.57)$$

onde,

$$\mathbf{E} = (\mathbf{D} - \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l [1 + (-1)^l] \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W}) \mathbf{M}^{-1}, \quad (5.58)$$

$$\mathbf{H} = (\mathbf{D} - \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \mathbf{\Pi}_l \mathbf{C}_l [1 - (-1)^l] \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W}) \mathbf{M}^{-1}, \quad (5.59)$$

$$\mathbf{X} = \mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (5.60)$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M}\mathbf{V}. \quad (5.61)$$

Utilizando as equações (5.56) e (5.57) obtém-se dois problemas de autovalores,

$$(\mathbf{H}\mathbf{E})\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (5.62)$$

e

$$(\mathbf{E}\mathbf{H})\mathbf{Y} = \lambda\mathbf{Y}, \quad (5.63)$$

onde $\lambda = \frac{1}{\nu^2}$. Assim λ_j são os autovalores dos problemas (5.62) e (5.63) e $\mathbf{X}(\lambda_j)$ e $\mathbf{Y}(\lambda_j)$ são os autovetores correspondentes.

Sejam λ_j os autovalores e $\mathbf{X}(\lambda_j)$ os autovetores, $j = 1, 2, \dots, (M+1)N$, então,

$$\mathbf{\Phi}_+(\nu_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\hat{\mathbf{I}} + \nu_j \mathbf{E}) \mathbf{X}(\lambda_j), \quad (5.64)$$

e

$$\mathbf{\Phi}_-(\nu_j) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\hat{\mathbf{I}} - \nu_j \mathbf{E}) \mathbf{X}(\lambda_j), \quad (5.65)$$

para $j = 1, 2, \dots, (M+1)N$. Na equação anterior, a expressão $\hat{\mathbf{I}}$ denota a matriz identidade de ordem $(M+1)N \times (M+1)N$.

Escrevendo as soluções das equações (5.36) e (5.42) na forma,

$$\mathbf{G}_+(x) = [\mathbf{G}^T(x, \mu_1), \mathbf{G}^T(x, \mu_2), \dots, \mathbf{G}^T(x, \mu_N)]^T, \quad (5.66)$$

$$\mathbf{G}_-(x) = [\mathbf{G}^T(x, -\mu_1), \mathbf{G}^T(x, -\mu_2), \dots, \mathbf{G}^T(x, -\mu_N)]^T, \quad (5.67)$$

a solução do problema homogêneo dado pelo equação (5.33) será,

$$\mathbf{G}_+(x) = \sum_{j=1}^{(M+1)N} [A_j \Phi_+(\nu_j) e^{\frac{-x}{\nu_j}} + B_j \Phi_-(\nu_j) e^{\frac{-(x_0-x)}{\nu_j}}], \quad (5.68)$$

$$\mathbf{G}_-(x) = \sum_{j=1}^{(M+1)N} [A_j \Phi_-(\nu_j) e^{\frac{-x}{\nu_j}} + B_j \Phi_+(\nu_j) e^{\frac{-(x_0-x)}{\nu_j}}], \quad (5.69)$$

onde A_j e B_j são constantes determinadas impondo-se as condições iniciais,

$$\mathbf{G}_+(0) = \mathbf{Q}_1(\mu), \quad (5.70)$$

$$\mathbf{G}_-(x_0) = \mathbf{Q}_2(\mu), \quad (5.71)$$

ou seja, substituindo as eqs. (5.70) e (5.71) nas equações (5.68) e (5.69), obtém-se

$$\sum_{j=1}^{(M+1)N} [A_j \Phi_+(\nu_j) + B_j \Phi_-(\nu_j) e^{-\frac{x_0}{\nu_j}}] = \mathbf{Q}_1(\mu), \quad (5.72)$$

e,

$$\sum_{j=1}^{(M+1)N} [A_j \Phi_-(\nu_j) e^{-\frac{x_0}{\nu_j}} + B_j \Phi_+(\nu_j)] = \mathbf{Q}_2(\mu). \quad (5.73)$$

Após obtida a solução para $\mathbf{G}(x, \mu)$ volta-se à equação (5.4) e encontra-se a intensidade de radiação $I(x, \lambda, \mu)$ para qualquer posição x e para qualquer comprimento de onda λ , onde,

$$I(x, \lambda, \mu) = \sum_{m=0}^M P_m \left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F} \right) g_m(x, \mu) \quad (5.74)$$

$g_m(x, \mu)$, $m = 0, 1, 2, \dots, M$ são as componentes do vetor $\mathbf{G}(x, \mu)$ e P_m representam os polinômios de Legendre.

No capítulo seguinte serão apresentados os resultados numéricos da abordagem contínua e comparados com os resultados das abordagens discretas (casos II e III) e resultados disponíveis na literatura.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS DA ABORDAGEM CONTÍNUA

Na abordagem contínua do problema de transporte de partículas para fótons encontra-se que a intensidade de radiação, com dependência da posição, do comprimento de onda e angular, será,

$$I(x, \lambda, \mu) = \sum_{m=0}^M P_m\left(\frac{-2\lambda}{\lambda_0 - \lambda_F} + \frac{\lambda_0 + \lambda_F}{\lambda_0 - \lambda_F}\right) g_m(x, \mu) \quad (6.1)$$

onde, a expansão em polinômios de Legendre é feita para $m = 0, 1, 2, \dots, M$ e as funções $g_m(x, \mu)$, $m = 0, 1, \dots, M$ são determinadas pelo método ADO considerando-se $(M + 1)$ grupos de energia. Encontradas as funções $g_m(x, \mu)$ pelo método ADO a solução $I(x, \lambda, \mu)$ fica completamente determinada e pode ser calculada em qualquer comprimento de onda λ .

De forma análoga ao capítulo 4, considera-se que a dose total é determinada por,

$$D_T(x) = m_e c^2 \int_{\lambda_0}^{\lambda_F} \mu_a(\lambda) \hat{\Phi}(x, \lambda) \frac{1}{\lambda^2} d\lambda, \quad (6.2)$$

onde,

$$\hat{\Phi}(x, \lambda) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda, \mu) d\mu, \quad (6.3)$$

representa o fluxo escalar, em todas as direções.

A expressão para os coeficientes de absorção $\mu_a(\lambda)$, é encontrada através da interpolação polinomial e o fator de buildup é calculado como anteriormente,

$$B(x) = \frac{D_T(x)}{D_0(x)}, \quad (6.4)$$

onde a expressão no denominador é denominada dose devido à radiação não colidida (primária) para o fluxo de energia não colidido $\hat{\Phi}(x, \lambda_0)$.

Para comparar os resultados da abordagem contínua com as abordagens anteriores é necessário calcular a expressão (6.1) em determinados pontos. Além disto, estipula-se um valor para λ_F (maior valor de λ considerado). A integral que aparece na definição da dose (6.2) é calculada analiticamente no Maple, de λ_0 até λ_F .

As condições de contorno são consideradas como no caso discreto, ou seja,

$$I(0, \lambda_0, \mu) = 1, \quad \text{para } \mu > 0, \quad (6.5)$$

$$I(0, \lambda_i, \mu) = 0, \quad \text{para } \mu > 0, \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (6.6)$$

$$I(\mu_0 x, \lambda_i, \mu) = 0 \quad \text{para } \mu < 0, \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (6.7)$$

Situação 1: Considera-se uma placa homogênea de água com energia incidente de 1Mev , determinam-se os fluxos [fótons/ $\text{cm}^2.\text{s}$], a dose total e a dose devido à radiação primária [Mev/g.s], em função da espessura da placa, expressa em livre caminho médio $\mu_0 x$. Para comparar com a abordagem discreta, calcula-se $\hat{\Phi}(x, \lambda)$ nos pontos obtidos na abordagem de λ_0 até λ , considerando quatro termos na expansão em polinômios de Legendre e $\lambda_F = 3.5$. Comparam-se também com os resultados obtidos pela abordagem do máximo para o mesmo intervalo de energia, considerando $N = 50$ para o método ADO. Os fluxos para a abordagem contínua são,

Tabela 6.1 – Fluxo escalar para expansão em quatro termos, pela abordagem contínua do problema.

mfp	$\Phi_1(x)$	$\Phi_2(x)$	$\Phi_3(x)$	$\Phi_4(x)$
1	0.100221	0.072799	0.036862	0.011656
2	0.030801	0.019078	0.005760	0.001331
3	0.008851	0.004916	0.000807	0.000241
4	0.002507	0.0012863	8.20×10^{-5}	6.11×10^{-5}

Relembrando a tabela com os fluxos para a abordagem do caso II de λ_0 até λ ,

Tabela 6.2 – Fluxo escalar para quatro grupos de energia pela abordagem de λ_0 até λ .

mfp	$\Phi_1(x)$	$\Phi_2(x)$	$\Phi_3(x)$	$\Phi_4(x)$
1	0.135034	0.014884	0.013728	0.010492
2	0.031736	0.005029	0.004882	0.005547
3	0.008388	0.001564	0.001530	0.002075
4	0.002355	0.000478	0.000464	0.000690

Pode-se observar pelas tabelas (6.1) e (6.2) valores aproximados, em termos de ordem de grandeza, entre os valores dos fluxos pelas abordagens contínua e do caso II (λ_0 até λ). Acredita-se, que a diferença de valores, deve-se a condição de que no caso II os extremos do intervalo não pertencem ao conjunto de pontos discretizados, enquanto que, na abordagem contínua a integral inclui estes extremos.

O comportamento gráfico dos fluxos, para uma placa de comprimento $3mfp$, pode ser observado na figura seguinte,

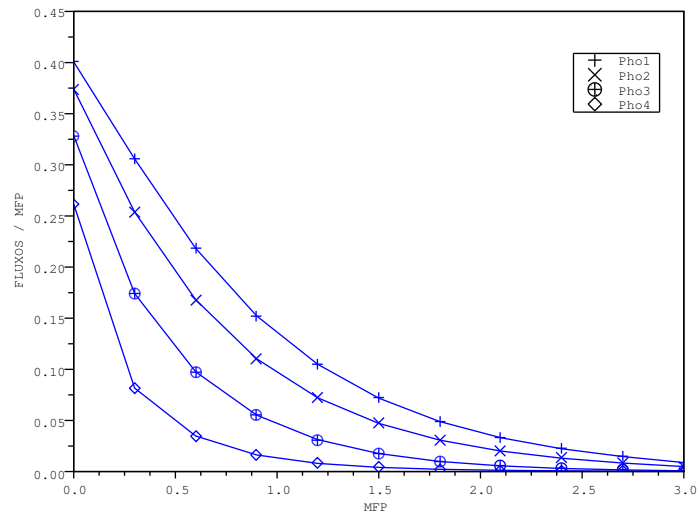


Figura 6.1 – Fluxos pela abordagem contínua, para quatro grupos de energia para uma placa de comprimento 3 MFP.

O gráfico para a dose total e dose devido a radiação primária, considerando a abordagem contínua, com quatro termos na expansão em polinômios de Legendre, aparece na figura seguinte,

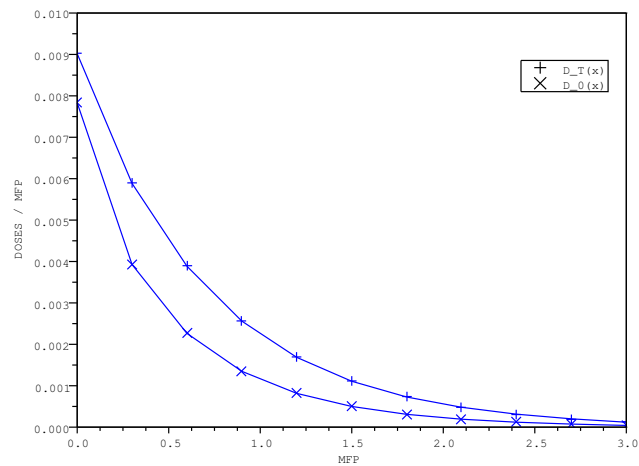


Figura 6.2 – Dose total e dose devido a radiação primária para uma placa de comprimento 3 MFP.

Pode-se comparar os valores para a dose total e dose devido a radiação primária para as três metodologias, considerando $\lambda_F = 3.5$,

Tabela 6.3 – Dose total e dose devido a radiação primária para quatro grupos de energia pela abordagem (1) caso II - de λ_0 até λ , (2) caso III - de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ e (3) contínua.

mfp	$D_T(x)$			$D_0(x)$		
	(1)	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)
1	0.001318	0.002754	0.001670	0.001077	0.002049	0.000891
2	0.000342	0.000866	0.000449	0.000253	0.000518	0.000185
3	9.59×10^{-5}	0.000298	0.000119	6.69×10^{-5}	0.000146	4.20×10^{-5}

Na figura seguinte pode-se observar o comportamento da dose total, para o mesmo intervalo de energia, para uma placa de comprimento $3mfp$, pelas abordagens do caso II (de λ_0 até λ), do caso III (do máximo) e abordagem contínua,

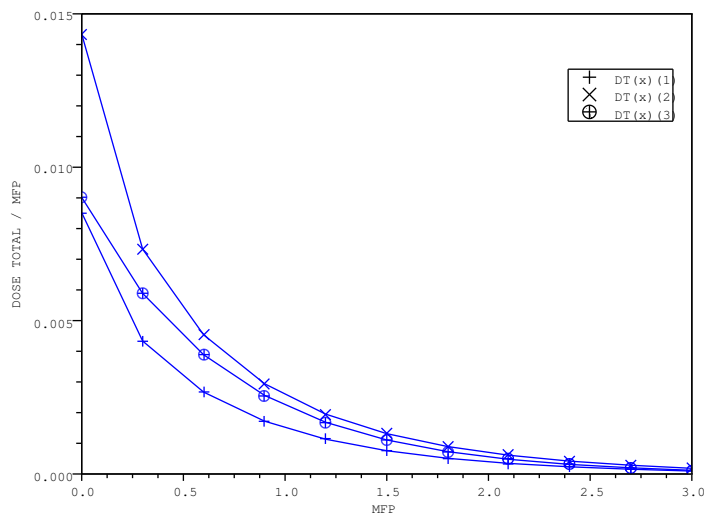


Figura 6.3 – Dose total para quatro grupos de energia para uma placa de comprimento 3 MFP, pelas abordagens (1) caso II, (2) caso III e (3) contínua.

Observa-se na tabela (6.3) e também na figura (6.3) que os valores das doses são

muito próximos nas três abordagens. Percebe-se uma pequena diferença de valores para a dose total, na extremidade inicial, $x = 0$ da placa para a abordagem do caso III (máximo). Porém, a partir de $0.5mfp$ as três abordagens resultam em valores muito próximos, destaca-se que a abordagem do caso III e a abordagem contínua incluem os extremos do intervalo o que justifica a proximidade um pouco maior neste caso, como pode-se observar na figura (6.3).

Considera-se agora, a mesma situação anterior, com quatro polinômios na expansão em polinômios de Legendre, onde se encontram $g_0(x, \mu)$, $g_1(x, \mu)$, $g_2(x, \mu)$, $g_3(x, \mu)$ pelo método ADO, mas calculados em seis valores de comprimento de onda, utilizados como os valores obtidos na abordagem de λ_0 até λ (naquele caso considerados como seis grupos de energia). Neste caso tem-se $\hat{\Phi}(x, \lambda_0)$, $\hat{\Phi}(x, \lambda_1)$, $\hat{\Phi}(x, \lambda_2)$, $\hat{\Phi}(x, \lambda_3)$, $\hat{\Phi}(x, \lambda_4)$, $\hat{\Phi}(x, \lambda_5)$, que representam os fluxos escalares calculados em cada um dos valores de comprimento de onda discretizado, o valor máximo de λ é $\lambda_F = 4$ (como ocorre na abordagem discreta) e $N = 50$ para a quadratura do método ADO,

Tabela 6.4 – Fluxo escalar para expansão com quatro termos, pela abordagem contínua do problema, calculados em seis comprimentos de onda.

mfp	$\Phi_1(x)$	$\Phi_2(x)$	$\Phi_3(x)$	$\Phi_4(x)$	$\Phi_5(x)$	$\Phi_6(x)$
1	0.098501	0.086680	0.067304	0.044147	0.023756	0.005634
2	0,030920	0,025689	0,017421	0,008398	0.002575	0.002171
3	0.009653	0.007743	0.004782	0.001713	0.001458	0.000105

Comparando-se as tabelas (6.1) e (6.4) vemos a concordância entre os valores, em termos de ordem de grandeza, já que os valores são apresentados em pontos discretizados distintos, além disto o comportamento gráfico dos fluxos não é alterado, conforme pode-se observar na figura seguinte para uma placa de comprimento $3mfp$,

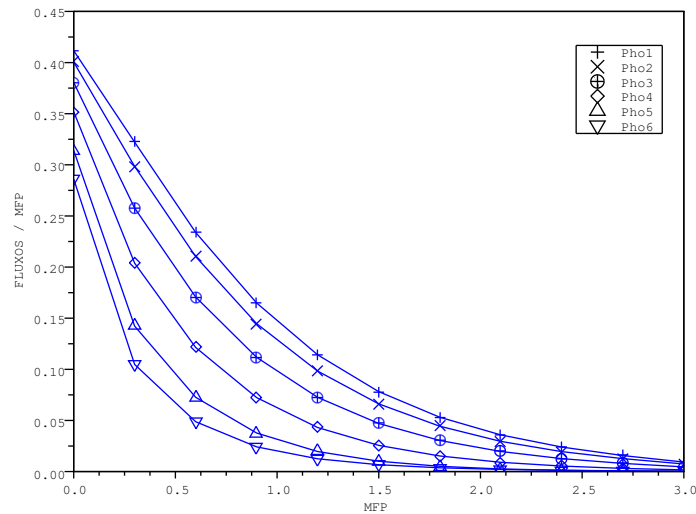


Figura 6.4 – Fluxos pela abordagem contínua, calculados em seis pontos discretos.

Situação 2: Resolve-se o mesmo problema da situação (1), considerando a intensidade de radiação calculada em seis valores de comprimento de onda, considerados também neste caso como os valores obtidos pela abordagem discreta de λ_0 até λ , onde $\lambda_F = 4$, porém utilizam-se seis termos na expansão em polinômios de Legendre, ou seja $m = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, encontrando $g_0(x, \mu), g_1(x, \mu), g_2(x, \mu), g_3(x, \mu), g_4(x, \mu), g_5(x, \mu)$ pelo método ADO. Encontram-se os fluxos, a dose total e dose devido a radiação primária e o fator de buildup,

Tabela 6.5 – Fluxo escalar para seis termos na expansão, pela abordagem contínua do problema, calculados em seis comprimentos de onda.

mfp	$\Phi_1(x)$	$\Phi_2(x)$	$\Phi_3(x)$	$\Phi_4(x)$	$\Phi_5(x)$	$\Phi_6(x)$
1	0.076562	0.063929	0.046951	0.031624	0.017575	0.005006
2	0.025513	0.019291	0.011494	0.005775	0.002182	0.0003021
3	0.007841	0.005466	0.002670	0.000987	0.000227	3.73×10^{-5}

Pode-se comparar os valores apresentados nas tabelas (6.4) e (6.5) para quatro e seis termos na expansão, respectivamente, e observa-se uma boa concordância entre os valores

encontrados.

Apresenta-se também, a tabela para a dose total e dose devido à radiação primária, comparada com as abordagens anteriores,

Tabela 6.6 – Dose total e dose devido a radiação primária para seis grupos de energia pela abordagem (1) Caso II (de λ_0 até λ), (2) Caso III (de $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ) e (3) contínua (expansão em seis termos).

mfp	$D_T(x)$			$D_0(x)$		
	(1)	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)
1	0.000768	0.005182	0.001198	0.000607	0.002049	0.000567
2	2.07×10^{-4}	5.46×10^{-4}	3.37×10^{-4}	1.48×10^{-4}	5.21×10^{-4}	1.17×10^{-4}
3	6.00×10^{-5}	4.78×10^{-4}	9.21×10^{-5}	4.05×10^{-5}	1.46×10^{-4}	2.62×10^{-5}

O comportamento gráfico para a dose total, para uma placa de comprimento $3mfp$, pode ser observado na figura seguinte,

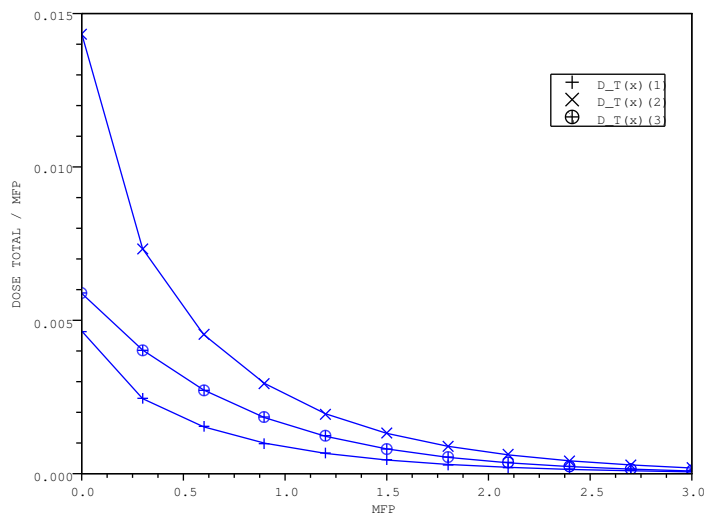


Figura 6.5 – Dose total pela abordagem (1) caso II (de λ_0 até λ), (2) caso III e (3) contínua, para seis grupos de energia ou expansão em seis termos.

Vemos na figura (6.5) que no início da placa, para $x = 0$ temos uma pequena diferença de valores, principalmente em relação a abordagem do caso III ($\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ até λ), mas a partir de aproximadamente $1mfp$ os valores são muito próximos pelas três metodologias.

Comparam-se também as doses devido a radiação não colidida (primária), para as três metodologias,

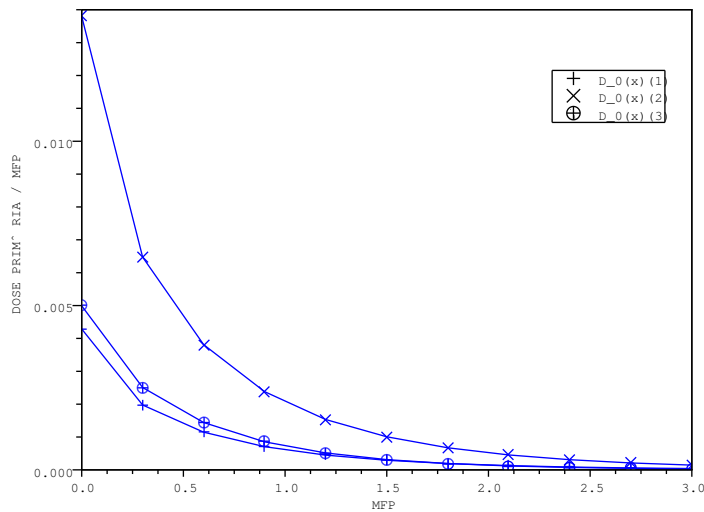


Figura 6.6 – Dose devido a radiação primária pela abordagem (1) Caso II , (2) Caso III, (3) contínua, para seis grupos de energia ou expansão em seis termos.

Novamente percebe-se a concordância entre os valores encontrados pelas três metodologias, principalmente para as abordagens do caso II e contínua, em que os valores são praticamente coincidentes.

Apresenta-se o comportamento do fator de Buildup pela abordagem do caso III (máximo) e contínua, com a utilização de seis termos na expansão em polinômios de Legendre, comparados com valores apresentados por [Blizard e Abbott, 1962], e [Hirayama, 1998],

Tabela 6.7 – Comparação do fator de buildup.

<i>mfp</i>	Caso III	Contínuo	Blizard	Hirayama
1	2.528191	2.111124	1.78	2.09
2	2.893312	2.870400	2.62	3.64
3	3.258865	3.512435	-	5.55
4	3.656916	4.069226	4.95	7.78
5	4.111678	4.548105	-	10.3
6	4.639924	4.951354	8.00	13.1

Dos autores citados acima, [Hirayama, 1998] utilizam-se 4 grupos de energia, enquanto para [Blizard e Abbott, 1962] esta informação não foi encontrada. Desta forma, faz-se um estudo comparativo do fator de buildup para a abordagem contínua em termos de números de termos utilizados na expansão em polinômios de Legendre,

Tabela 6.8 – Comparação do fator de buildup em função do número de termos na expansão em polinômios de Legendre.

<i>mfp</i>	M=4	M=6	M=8	Blizard	Hirayama
1	2.104919	2.111124	2.110266	1.78	2.09
2	2.826823	2.870400	2.872081	2.62	3.64
3	3.391533	3.512435	3.517025	-	5.55
4	3.834093	4.069226	4.079285	4.95	7.78
5	4.170986	4.548105	4.568432	-	10.3
6	4.417538	4.951354	4.988465	8.00	13.1

Observa-se que, para as expansões com seis e oito termos, tem-se concordância de no mínimo dois dígitos significativos, em termos da quantidade de elementos utilizados na expansão em polinômios de Legendre.

Pode-se observar na tabela (6.7), que as metodologias do caso III e contínua apresentam valores bem próximos, isto se deve pelo fato de que as integrais são ajustadas ao correto valor do intervalo, fazendo com que as abordagens do caso III e contínua sejam as mais adequadas para a análise do problema. No entanto, ainda, algumas diferenças no

caso III (máximo) e contínuo, devem-se a resolução totalmente analítica utilizada no caso contínuo, comparada com a resolução do caso III que utiliza a regra dos trapézios para a resolução das integrais.

Os valores apresentados por [Blizard e Abbott, 1962] são para o método de Monte Carlo, em meio infinito com aproximação para placa, e conforme o autor apresentam um erro de até 15%. Já os valores apresentados por [Hirayama, 1998] são para meio infinito utilizando o código EGS4 para Monte Carlo.

É importante destacar que na abordagem contínua pode-se calcular a intensidade de radiação em qualquer comprimento de onda. Outra questão importante, é que todas as integrais que aparecem no problema são resolvidas analiticamente, e nenhuma aproximação foi utilizada durante o processo. Desta forma, a solução encontrada para a intensidade de radiação e para as doses é considerada como uma solução exata do problema de transporte de radiação para fótons e permite uma análise geral do problema em termos de fluxos de radiação e comportamento da dose. Não se tem conhecimento na literatura de análise semelhante para problemas de placa plana, com condições de contorno fixas, o que destaca o método analítico contínuo proposto neste trabalho. Ainda, considerando-se a expansão em termos de polinômios de Legendre outras funções base ou expansões podem ser utilizadas para a abordagem de $[\lambda_0, \infty)$.

7 CONCLUSÕES

Propusemos neste trabalho o estudo de abordagens analíticas da equação de transporte para fótons, com dependência espectral, considerando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina para espalhamento Compton, com particular aplicação no cálculo de doses em radioterapia. Para alcançar este objetivo primeiramente resolve-se o problema para placa plana apresentado na literatura e com resultados disponíveis para comparação. Para este problema, reduzido a uma pequena faixa de energia, dependendo da energia inicial, os resultados obtidos pelo método ADO concordam plenamente com os resultados apresentados na literatura, além de possibilitar a utilização de um número pequeno de pontos de quadratura para a convergência do método.

Na busca de soluções para o problema real apresentam-se duas abordagens discretas da dependência espectral, considerando o intervalo de energia de $[\lambda_0, \infty)$. De acordo com o nosso conhecimento não existem na literatura resultados numéricos para este problema aplicado a placas planas, em que condições de contorno interferem nos resultados finais, o que caracteriza a dificuldade de dados comparativos. Porém, comparam-se os resultados com aproximações, em meio infinito ou semi-infinito, apresentadas por [Blizard e Abbott, 1962] e [Hirayama, 1998].

Após o estudo das abordagens discretas apresenta-se uma abordagem contínua (espectral) para o problema, em que se propõem uma expansão da solução procurada em termos de polinômios de Legendre. Nesta abordagem contínua todos os cálculos envolvendo a dependência espectral (variável λ), que serão os coeficientes de entrada no problema resolvido pelo método ADO, são obtidos analiticamente através do software Maple. Esta abordagem fornece uma solução analítica para a intensidade de radiação para qualquer comprimento de onda. De acordo com nosso conhecimento, não existe abordagem semelhante para problemas envolvendo transporte de radiação para fótons. Em todas as situações abordadas, após o tratamento da dependência espectral, o problema resultante foi resolvido pelo método ADO.

Desta forma, a partir dos resultados obtidos, as principais contribuições originadas durante o desenvolvimento deste trabalho podem ser resumidas em:

- Resolução da equação de transporte de fótons, com dependência espectral envolvendo

o termo integral com limite variável.

- Obtenção de resultados numéricos e comportamento gráfico, para o problema da placa plana, submetido a condições de contorno fixas nas extremidades.
- Resolução totalmente analítica, através de uma abordagem espectral do problema, que permite uma análise da intensidade de radiação para qualquer comprimento de onda, sem discretização da dependência espectral.
- Obtenção de resultados numéricos e comportamento gráfico, para a abordagem contínua do problema, que mostram exatamente que as condições de contorno introduzidas na placa possuem o efeito de reduzir o fluxo próximo a superfície, quando comparado com o fluxo em um meio infinito [Blizard e Abbott, 1962].
- Obtenção de resultados numéricos com baixo esforço computacional, gerados em menos de 5 segundos, devido à utilização do método analítico de ordenadas discretas (ADO) que reduz o problema original ao cálculo de um esquema de quadratura no semi-intervalo, que implica num ganho de precisão na discretização em relação à esquemas clássicos de quadratura.

Pelo exposto, é entendido que os objetivos deste trabalho tenham sido alcançados. Outras perspectivas de continuidade e aplicação incluem a utilização da abordagem contínua em problemas envolvendo mais de um meio, o estudo de outras formas de expansão da intensidade de radiação em termos de polinômios de Legendre ou em termos de outras funções base e a aplicação da abordagem contínua em outros problemas onde a dependência espectral (de energia) assume papel relevante.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Apostol, T. M., 1969. “**Calculus - Vol. II**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Atkinson, K. E., 1988. “**An Introduction to Numerical Analysis**”. John Wiley & Sons, Inc.

Attix, F., 1986. “**Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Bames, P. and Rees, D., 1972. “**A Concise Textbook of Radiotherapy**”. Faber e Faber, London.

Barichello, L., Camargo, M., Rodrigues, P., and Siewert, C., 2001. “Unified Solutions to Classical Flow Problems Based on the BGK Model”, **ZAMP**, vol. 52, pp. 517–524.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999. “A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model With Complete Frequency Redistribution”, **Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 62, pp. 665–675.

Bell, G. I. and Glasstone, S., 1970. “**Nuclear Reactor Theory**”. Litton Educational Publishing, Inc.

Bitelli, T., 2006. “**Física e Dosimetria das Radiações**”. Editora Atheneu, São Paulo.

Blizard, E. P. and Abbott, L. S., 1962. “**Reactor Handbook, vol. III, part B - Shielding**”. John Wiley & Sons, New York.

Bond, T. C., 2001. “Spectral Dependence of Visible Light Absorption by Carbonaceous Particles Emitted from Coal Combustion”, **J. Geophys.**, vol. 28(21), pp. 4075–4078.

Boyd, J. P., 2000. “**Chebyshev and Fourier Spectral Methods**”. DOVER Publications, Inc., New York.

Cabrera, L. and Barichello, L., 2006. “Unified Solutions to Some Classical Problems in Rarefield Gas Dynamics Based on the One-Dimensional Linearized S-model Equation”, **ZAMP**, vol. 57, pp. 285–312.

Camargo, M. and Barichello, L., 2004. “Unifield Approach for Variable Collision Frequency Models in Rarefied Gas Dynamics”, **Transport Theory and Sthatistical Physics**, vol. 33, pp. 227–260.

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

Chalhoub, E. and Garcia, R., 2000. “The Equivalence Between Two Techniques of Angular Interpolation for the Discrete-Ordinates Method”, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 317–535.

Chandrasekhar, S., 1960. “**Radiative Transfer**”. Dover Publications, Inc., New York.

Chen, M. F. and Faw, R., 1993. “Build-up Factors for Hight Energy Gamma Rays Normally Incident on Slabs of Lead, Iron, Concrete and Water”, **Radiation Protection Dosimetry**, vol. 50(1), pp. 31–37.

Dongarra, J., Brunch, J., Moler, C., and Stewart, G., 1979. “**LINPACK Users Guide**”. Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia.

Duderstadt, J. J. and Martin, W. R., 1979. “**Transport Theory**”. John Wiley & Sons, Inc.

Elsässer, T., Krämer, M., and Scholz, M., 2008. “Accuracy of the Local Effect Model for the Prediction of Bilogic Effects of Carbon Ion Beams in Vitro and in Vivo”, **Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.**, vol. 71(3), pp. 866–872.

Fano, U., Spencer, L. V., and Berger, M., 1959. “**Encyclopedia of Physics - Volume XXXVIII/2, Neutrons and Related Gamma Ray Problems**”. Springer-Verlag, Berlin.

Fraass, B., 2008. “Erros in Radiotherapy: Motivation for Development of New Radiotherapy Quality Assurance Paradigms”, **Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.**, vol. 71(1), pp. S162–S165.

Garcia, R., 2002. “**Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Integro-Diferencial**”. Notas de aula de mini-curso apresentado na I Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, 14 a 17 de janeiro de 2002, PUCRS, Porto Alegre.

Goldschmidt, G., Reichert, J., and Barichello, L., 2008. “A Discrete-Ordinates Solution for a Radiation Therapy Problem”, **12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, vol. Belo Horizonte – MG.

Goldstein, H., 1959. “**Fundamental Aspects of Reactor Shielding**”. Addison-Wesley Publishing Company, INC., Massachusetts, U.S.A.

Henríquez, F. C. and Castrillón, S. V., 2008. “A Novel Method for the Evaluation of Uncertainty in Dose-Volume Histogram Computation”, **Int. J. Radiation Oncology Biol. Phys.**, vol. 70(4), pp. 1263–1271.

Hirayama, H., 1986. “Exposure Buildup Factors of High-Energy Gamma Rays for Water, Concrete, Iron and Lead”, **Nuclear Technology**, vol. 77, pp. 60–67.

Hirayama, H., 1994a. “Approximating Model for Multilayer Gamma-Ray Buildup Factors by Transmission Matrix Method: Application to Point Isotropic Source Geometry”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 120, pp. 211–222.

Hirayama, H., 1994b. “A New Approximating Model for Gamma-Ray Buildup Factors of Stratified Shields”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 118, pp. 91–102.

Hirayama, H., 1995. “Calculation of Gamma-Ray Exposure Buildup Factors up to 40 mfp using the *EGS₄* Monte Carlo Code with a Particle Splitting”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 32(12), pp. 1201–1207.

Hirayama, H., 1998. “Appication of the *EGS₄* Monte Carlo Code to a Study of Multlayer Gamma-Ray Exposure Buildup Factors”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 35(11), pp. 816–829.

Howell, J. and Perlmutter, M., 1964. “Radiant Transfer Through a Gray Gas Between Concentric Cylinders Using Monte Carlo”, **Journal of Heat Transfer**, vol. 86, pp. 169–179.

Jeans, J., 1917. “The Equation of Radiative Transfer of Energy”, **Mon. Not. Royal Astron. Soc.**, (78), pp. 28–36.

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

Knackfuss, R. and Barichello, L., 2006. “On the Temperature-Jump Problem in Rarefield Gas Dynamics: the Effect of the Cercignani-Lampis Boundary Condition”, **SIAM J. Applied Mathematics**, vol. 66, pp. 2149–2186.

Krämer, M., Jäke, O., Haberer, T., Kraft, G., Schardt, D., and Weber, U., 2000. “Treatment Planning for Heavy-Ion Radiotherapy: Physical Beam Nodel and Dose Optimization”, **Phys. Med. Biol.**, vol. 45, pp. 3299–3317.

Lunelli, R., 2002. “**Solução da Equação de Transporte de Fótons para uma Placa Plana Heterogênea, Modelo de Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Maurenente, A., 2007. “**Método de Monte Carlo Aplicado ao Modelamento Espectral de Meios Participantes Através da Utilização da Função Distribuição de Energia de Corpo Negro nas Linhas de Absorção**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Rodrigues, B., 2007. “**Metodologia para a Obtenção da Solução da Equação de Transporte de Boltzmann Considerando Espalhamento Compton Simulado por Klein-Nishina**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Rodrigues, B., de Vilhena, M., and Borges, V., 2006. “Determination of the Exposure Build-up Factor in a Slab using the LTS_N Method”, **Kerntechnik**, vol. 4(71), pp. 182–184.

Sauer, L., 1997. “**Solução da Equação de Transporte Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina: Uma Aplicação ao Cálculo de Dose**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

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

Shirani, A. and Shahriari, E., 2007. “Determination of Neutron Dose-Equivalent Buildup Factors for Infinite Slabs Irradiated by Point Isotropic Neutron Sources Using the MCNP Code”, **Journal of Sciences, Islamic Republic of Iran**, vol. 18(2), pp. 177–180.

Shultis, J. K. and Faw, R. E., 2000. “**Radiation Shielding**”. American Nuclear Society, Inc., La Grange Park, Illinois, USA.

Siewert, C. E., 2000. “A Discrete-Ordinates Solution for Multigroup Transport Theory with Upscattering”, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 255–273.

Siewert, C. E., 2003a. “The Linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions of the Temperature-Jump Problem”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 77, pp. 417.

Siewert, C. E., 2003b. “The Linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems”, **ZAMP**, vol. 54, pp. 273–303.

Smith, B., Boyle, J., Dongarra, J., Garbow, B., Ikebe, Y., Klema, V., and Moler, C., 1976. “**Matrix Eigensystem Routines - EIPACK Guide**”. Springer Verlag, Berlin.

Solovjov, V. and Webb, B., 2002. “Local-Spectrum Correlated Model for Radiative Transfer in Non-Uniform Gas Media”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 73(2), pp. 361–373.

Souto, R. P., 2006. **“Recuperação de Perfis Verticais de Propriedade Óticas Inerentes a Partir da Radiação Emergente da Água”**, Tese de doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP, Brasil.

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

Wellele, O. J. M., 2007. **“Planejamento de Experimentos para Identificação de Propriedades Termofísicas de Materiais Semitransparentes”**, Tese de doutorado, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Wood, J., 1982. **“Computational Methods in Reactor Shielding”**. Oxford: Pergamon Press.

Yoshida, Y., 2006. “Development of Fitting Methods Using Geometric Progression Formulae of Gamma-Ray Buildup Factors”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 43(12), pp. 1446–1457.

I TABELAS DOS COEFICIENTES DE ATENUAÇÃO E ABSORÇÃO

Neste apêndice são apresentados os valores dos coeficientes de atenuação (σ) e absorção μ_a da água e do chumbo, para as energias de interesse. Estes coeficientes foram obtidos de [Blizard e Abbott, 1962], e também podem ser obtidos no site: <http://physics.nist.gov>, e foram interpolados utilizando o software Maple.

Tabela I.1 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de 1Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.8765	0.0751	0.02837
0.5606	0.0921	0.0295
0.3155	0.1163	0.0289
0.1607	0.1461	0.0255

Tabela I.2 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de 1Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.9370	0.0728	0.0281
0.7335	0.0818	0.0289
0.5160	0.0953	0.0295
0.3460	0.1124	0.0292
0.2234	0.1248	0.0275
0.1310	0.1535	0.0243

Tabela I.3 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de 1Mev para água.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(H_2O)[cm^2/g]$
0.9278	0.0732	0.0314
0.7153	0.0827	0.0325
0.5185	0.0952	0.0330
0.3878	0.1077	0.0328
0.3015	0.1187	0.0320
0.2509	0.1263	0.0312
0.2214	0.1317	0.0305
0.2067	0.1345	0.0301

Tabela I.4 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de 1Mev para água.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(H_2O)[cm^2/g]$
0.9514	0.0723	0.0313
0.7910	0.0790	0.0322
0.6144	0.0886	0.0329
0.4741	0.0986	0.0330
0.3751	0.1087	0.0327
0.3078	0.1169	0.0321
0.2628	0.1237	0.0314
0.2332	0.1290	0.0308
0.2150	0.1326	0.0303
0.2056	0.1347	0.0303

Tabela I.5 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando regra de Simpson, cinco valores de energia e energia incidente de 1.25Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(H_2O)[cm^2/g]$	$\sigma_j(Pb)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Pb)[cm^2/g]$
1.25	0.0633	0.0295	0.6787	0.0325
0.5622	0.0920	0.0330	1.3999	0.0749
0.3627	0.1106	0.0326	2.7830	0.1652
0.2677	0.1238	0.0312	5.3526	0.31117
0.2121	0.1334	0.0300	8.9687	0.5119

Tabela I.6 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de 0.6Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.5532	0.0923	0.0296
0.4081	0.1051	0.0295
0.2606	0.1239	0.0282
0.1452	0.1502	0.0249

Tabela I.7 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de 0.6Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.5767	0.0909	0.0296
0.4926	0.0944	0.0295
0.3839	0.1077	0.0298
0.2811	0.1207	0.0285
0.1945	0.1373	0.0267
0.1205	0.1557	0.0238

Tabela I.8 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de 0.6Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.5861	0.0904	0.0296
0.5329	0.0933	0.0296
0.4552	0.0931	0.0294
0.3712	0.1091	0.0293
0.2924	0.1190	0.0287
0.2231	0.1309	0.0275
0.1628	0.1455	0.0256
0.1071	0.1604	0.0234

Tabela I.9 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de 0.6Mev .

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
0.5909	0.0901	0.0296
0.5545	0.0922	0.0296
0.4978	0.0967	0.0295
0.4313	0.1028	0.0293
0.3634	0.1099	0.0293
0.2995	0.1180	0.0287
0.2418	0.1272	0.0279
0.1905	0.1382	0.0266
0.1440	0.1505	0.0248
0.098	0.1693	0.0231

Tabela I.10 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia incidente de $2Mev$.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
1.5607	0.0563	0.0253
0.7789	0.0796	0.0288
0.3746	0.1087	0.0293
0.1748	0.1423	0.0260

Tabela I.11 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, seis valores de energia e energia incidente de $2Mev$.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
1.7629	0.0527	0.0245
1.1584	0.0656	0.0271
0.6955	0.0839	0.0292
0.4184	0.1041	0.0295
0.2508	0.1255	0.0281
0.1402	0.1514	0.0246

Tabela I.12 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, oito valores de energia e energia incidente de $2Mev$.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
1.8544	0.0513	0.0242
1.4088	0.0594	0.0259
0.9709	0.0716	0.0280
0.6549	0.0862	0.0294
0.4438	0.1016	0.0293
0.3016	0.1177	0.0288
0.2010	0.1357	0.0269
0.1224	0.1553	0.0239

Tabela I.13 – Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, dez valores de energia e energia incidente de $2Mev$.

E_j [Mev]	$\sigma_j(H_2O)[cm^{-1}]$	$\mu_{aj}(Ar)[cm^2/g]$
1.9022	0.0506	0.0240
1.5706	0.0561	0.0253
1.1878	0.0648	0.0270
0.8681	0.0755	0.0284
0.6309	0.0877	0.0295
0.4604	0.0935	0.0294
0.3369	0.1131	0.0291
0.2449	0.1267	0.0279
0.1731	0.1427	0.0260
0.1112	0.1584	0.0235

Tabela I.14 – Dados obtidos para água e chumbo para o cálculo da constante α .

Meio	$\rho(g/cm^3)$	A	Z	$\alpha[cm^{-1}]$
Água	1.00	18	7.42	0.165140
Chumbo	11.35	207.21	82	1.799371