

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO COM
NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE KLEIN-NISHINA:
UMA APLICAÇÃO AO CÁLCULO DE DOSE

por

Laurete Zanol Sauer

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Matemática Aplicada

Porto Alegre

1997

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO COM
NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE KLEIN-NISHINA:
UMA APLICAÇÃO AO CÁLCULO DE DOSE**

por

Laurete Zanol Sauer

Especialista em Matemática

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós - Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Matemática Aplicada

Área de Concentração: Engenharia Matemática

Aprovado por:

Prof. Dr. Volnei Borges (DENUC - UFRGS)
Prof. Dr. Jorge Rodolfo Zabadal (DENUC - UFRGS)
Prof. Dr. Marco Túlio Menna Barreto de Vilhena (CPGMAp - UFRGS)
Profª. Dra. Liliane Basso Barichello (Orientadora)

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale

Coordenadora do Programa de Pós - Graduação em
Matemática Aplicada
Porto Alegre, 1997.

16753

DISSERTAÇÃO/MAT..
S255S
1997

MAT
1998/155350-7
1997/03/16
8117

UFRGS
SISTEMAS DE BIBLIOTECAS
BIBLIOTECA SETORIAL DE MATEMÁTICA

Ao meu marido,

Flávio e

aos meus filhos ,

Felipe e Débora.

AGRADECIMENTOS

Sempre que alcançamos uma meta, sentimo-nos agradecidos, não só aos que nos ajudaram a alcançá-la, como também aos que possibilitaram a sua realização. Há alguns que pertencem, ao mesmo tempo, aos dois grupos. Outros, ainda, que, embora pertencendo a um dos grupos, assumem em nosso coração um lugar de destaque, despertam sentimentos que fazem com que repensemos nossa caminhada. Assim, gostaria de agradecer à colega e amiga Isolda Lima, pelas mãos de quem, abriram-se as portas.

À Vânia Slaviero e à Solange Sartor, pela sua presença, estímulo e companheirismo sempre constantes.

Ao amigo e professor Oclide Dotto, pelo seu contínuo interesse, sempre disposto a auxiliar.

Gostaria de agradecer ainda, com os mesmos sentimentos de gratidão, à orientadora Liliane Basso Barichello, por sua contínua orientação, solicitações e desafios tão importantes.

Ao professor Marco Tulio de Vilhena por seus comentários inteligentes e prestativos.

Ao colega Leonardo Trindade pela disponibilidade e colaboração nas discussões.

Aos colegas de departamento, pelo carinho e amizade.

À Universidade de Caxias do Sul que possibilitou-me a realização deste trabalho.

A todos os amigos que, de alguma forma, participaram.

À minha mãe Odila, a quem devo a vida e ao meu pai Edevino, onde quer que ele esteja, pelo exemplo.

Ao Flávio, Felipe e Débora, pelo amor, incentivo e paciência incansáveis.

À Deus, por tudo!

“Quando olhamos para o céu em noite calma e límpida, sentimos que a nossa inteligência é franzina para conceber a obra maravilhosa do Criador. Diante de nossos olhos pasmados, as estrelas são uma caravana luminosa a desfilar pelo deserto insondável do infinito, as nebulosas imensas e os planetas rolam segundo leis eternas, pelos abismos do espaço! Uma noção, entretanto, surge logo, bem nítida, em nosso espírito: a noção de número.”

Malba Tahan

RESUMO

Neste trabalho propomos uma solução para a equação de transporte multigrupo com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina. A idéia básica consiste na aproximação do termo integral em energia, resultando em uma solução final para valores discretos de energia. Resolvemos o sistema resultante, em termos da variável espacial e angular, usando o método LTS_N , que fornece uma solução analítica para o problema de ordenadas discretas.

Aplicamos essa formulação ao cálculo de dose e apresentamos resultados numéricos para quatro e cinco valores de energia.

ABSTRACT

In this work we propose a solution to the multigroup transport equation with Klein-Nishina scattering kernel. The main idea is the approximation of the integral energy term such that we obtain the final solution for discrete energy values. We solve the resulting system, in terms of the spacial and angular variable, using the LTS_N method, that provides an analytical solution to the discrete ordinates problem.

We applied the formulation on the calculation of the dosis and we present numerical results for four and five energy values.

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Espessura da placa
A	Massa atômica
$\mathbf{A}_N(s)$	Matriz do sistema gerado pela formulação LTS _N
$\mathbf{A}_N^{-1}(s)$	Inversa da matriz $\mathbf{A}_N(s)$
$\mathbf{A}_j(s)$	Matriz do LTS _N para a energia j
$\mathbf{A}_j^{-1}(s)$	Inversa da matriz $\mathbf{A}_j(s)$
$D_T(x)$	Taxa de dose total absorvida
$D_0(x)$	Dose devido ao fluxo não espalhado
E_0	Energia incidente na placa
f_m	Fluxo angular de partículas incidente na fronteira $x = 0$ da placa
g_m	Fluxo angular de partículas incidente na fronteira $x = a$ da placa
$I(x, \mu_m)$	Fluxo angular na direção μ_m e na posição x
$\bar{I}(s, \mu_m)$	Transformada de Laplace da função $I(x, \mu_m)$
$I(x, \lambda, \mu)$	Fluxo angular na direção μ , posição x para comprimento de onda λ
$\mathbf{I}_{jn}(x)$	Vetor componente espacial da expansão do fluxo angular para a energia j na direção n
$\mathbf{I}_{jn}(0)$	Vetor componente espacial da expansão do fluxo angular na posição $x = 0$ para a energia j

$\bar{\mathbf{I}}_{jn}(s)$	Vetor componente espacial transformado da expansão do fluxo angular para a energia j na direção n
$K(\lambda', \lambda)$	Núcleo de espalhamento de Klein-Nishina
\mathcal{L}^{-1}	Transformada inversa de Laplace
M	Número de energias considerado
N	Número de pontos da quadratura de Gauss
N_A	Constante de Avogadro
$S(x, \mu_m)$	Termo de fonte
s_k	Raízes do polinômio característico da matriz $\mathbf{A}_j(s)$
\mathbf{T}	Matriz triangular superior
\mathbf{U}	Matriz unitária
\mathbf{U}^T	Matriz transposta da matriz \mathbf{U}
w_m	Pesos da quadratura de Gauss usada na energia
$\bar{\mathbf{Z}}_j(s)$	Vetor de fonte transformado para a energia j
α	Constante dependente do meio
Δ	Comprimento dos subintervalos do intervalo $(\lambda_0, \lambda_0 + 2)$ para o cálculo da integral em λ por Simpson
δ	Função Delta de Dirac
$\delta_{n,m}$	Função Delta de Kronecker
λ	Comprimento de onda do fóton espalhado
λ'	Comprimento de onda do fóton incidente
$\mu_{o,i}$	Coefficiente de absorção para a energia i

μ_m	Raízes do polinômio de Legendre de grau n
μ_0	Co-seno do ângulo de espalhamento
ρ	Densidade do meio material
σ_{s_l}	Componentes de ordem l da secção de choque diferencial de espalhamento
σ_T	Secção de choque total
$\sigma(E)$	Coefficiente de atenuação linear para a energia E
$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega)$	Secção de choque de espalhamento na equação de transporte dependente da energia
$\widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda)$	l -ésima componente da expansão da secção de choque de espalhamento em termos de polinômios de Legendre
$\Psi_i(x)$	Fluxo escalar de partículas para a energia i
ω_m	Pesos da quadratura de Gauss usada na variável angular
Ω	Vetor ângulo sólido do fóton espalhado
Ω'	Vetor ângulo sólido do fóton incidente

LISTA DE TABELAS

4.1	Fluxo Escalar para quatro valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss	37
4.2	Fluxo Escalar para cinco valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss	40
4.3	Fluxo Escalar para cinco valores de energia, com aproximação por Simpson	42
D1	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, quatro valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a $2MeV$	67
D2	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando quadratura de Gauss, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a $2MeV$	68
D3	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a $2MeV$	68
D4	Coefficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a $1.25MeV$	69
D5	Dados obtidos para água para o cálculo da constante α	69

LISTA DE FIGURAS

4.1	Fluxo Escalar para quatro valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss	38
4.2	Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, em função da posição, para quatro valores de energia e aproximação por quadratura de Gauss	39
4.3	Fluxo Escalar para cinco valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss	40
4.4	Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, para cinco valores de energia e aproximação por quadratura de Gauss	41
4.5	Fluxo Escalar para cinco valores de energia e aproximação por Simpson	42
4.6	Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, para cinco valores de energia e aproximação por Simpson	43
4.7	Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, para cinco valores de energia e aproximação por Simpson para a placa de 100cm e energia do feixe incidente de fótons igual a 1.25Mev	44

SUMÁRIO

Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Símbolos	vi
Lista de Tabelas	ix
Lista de Figuras	x
1. INTRODUÇÃO	01
2. O MÉTODO LTS_N	04
2.1 Introdução	04
2.2 Formulação LTS_N	04
2.3 Inversão da matriz $A_N(s)$	11
3. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL PARA VALORES DISCRETOS DE ENERGIA COM NÚCLEO DE KLEIN-NISHINA	18
3.1 Introdução	18
3.2 Formulação	18
3.3 Cálculo da integral em λ pela Regra de Simpson	24
3.4 Cálculo da integral em λ usando a Quadratura de Gauss	30
4. RESULTADOS NUMÉRICOS: UMA APLICAÇÃO AO CÁLCULO DE DOSE	34
4.1 Descrição Geral	34
4.2 Aplicações	36

5. CONCLUSÕES	45
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	47
APÊNDICE A: Dedução da Equação de Transporte - Forma Genérica	52
APÊNDICE B: A Equação de Transporte Multigrupo escrita em termos de comprimento de onda	59
APÊNDICE C: Integração Numérica	64
APÊNDICE D: Tabelas dos Coeficientes de Atenuação e Absorção	67

1. INTRODUÇÃO

A complexidade das equações que descrevem os processos de transporte de partículas, bem como o grande esforço computacional demandado pela abordagem probabilística, justifica a necessidade de que sejam adotados métodos determinísticos para a obtenção de soluções numéricas precisas. Nesse contexto, a aproximação S_N [6] da equação de transporte, que consiste, basicamente, na discretização da variável angular e conseqüente aproximação do termo integral por quadratura de Gauss, tem sido amplamente usada. Essa abordagem foi desenvolvida inicialmente para o estudo de problemas relacionados com atmosferas estelares [9] e posteriormente tem sido estendida às mais diversas áreas, nas quais a equação de transporte é aplicável [2].

Há poucos anos atrás foi obtida uma solução analítica para o problema de ordenadas discretas (equações S_N), unidimensional [25], no sentido que nenhuma aproximação foi usada ao longo da derivação da referida solução. A formulação se baseia na aplicação da transformada de Laplace à variável espacial da equação, resultando em um sistema linear algébrico para o fluxo transformado, que posteriormente é invertido analiticamente através da técnica de expansão de Heaviside. Essa abordagem foi denominada método LTS_N [25,3,4].

Inicialmente esse método foi aplicado a problemas unidimensionais homogêneos e heterogêneos, com anisotropia linear [3,4]. A generalização da formulação a problemas com grau de anisotropia arbitrário foi proposta a seguir [14]. A partir

daí, a aplicação desse método vem sendo testada em uma variedade de problemas de interesse em teoria de transporte [17,21], sendo que a convergência da solução LTS_N foi provada segundo a abordagem de semi-grupos [15]. Foram apresentadas contribuições relativas ao tratamento de problemas multidimensionais [29,30,31], problemas sem simetria azimutal [19] e dependentes do tempo [20], bem como problemas de multigrupo [24]. Ainda, uma formulação com dependência angular contínua foi obtida [26].

No entanto, os resultados numéricos relativos a todas as aplicações acima citadas, estavam restritos às aproximações de ordem $N=20$, aproximadamente, devido, basicamente, ao tratamento computacional das exponenciais presentes na solução, bem como da inversão da matriz simbólica associada ao método, resultante da aplicação da Transformada de Laplace. Esses problemas foram superados a partir de uma modificação na base exponencial, recentemente implementada [5] e o desenvolvimento de um algoritmo recursivo que possibilita a inversão da matriz simbólica para valores de N grandes [7]. Uma revisão mais completa sobre o método, incluindo recentes avanços, pode ser encontrada em Vilhena et al.[27].

Neste trabalho propomos a solução da equação de transporte, com núcleo de Klein-Nishina, para valores discretos de energia, através do método LTS_N . Para tal, o termo integral em energia da equação é aproximado, através de uma das duas abordagens: quadratura de Gauss ou regra de Simpson, e o método LTS_N é aplicado ao sistema resultante, fornecendo uma solução analítica para a variável espacial. Abordagens anteriores foram propostas por Wood [28] e Trindade [23]. Em ambos

os casos, as equações P_N [6] foram utilizadas. No primeiro caso as mesmas foram resolvidas pelo método dos momentos e , no segundo, através da transformada de Laplace.

Aqui, além de estudarmos as características específicas do método LTS_N , associadas a esse tipo de problema, nosso objetivo também é a aplicação da formulação proposta para o cálculo da dose absorvida, já que uma das motivações na proposta desse método foi a aplicação do mesmo em planejamento de doses em radioterapia, associada à solução de problemas inversos [3]. Cumpre salientar, no entanto, que a aplicação da abordagem que apresentamos é adequada para faixas de energia abaixo de $1MeV$, quando o espalhamento dos fótons se caracteriza pelo efeito Compton.

Assim, no capítulo 2 descrevemos o método LTS_N , o qual aplicamos, no capítulo 3, ao sistema resultante da aproximação da equação de transporte para valores discretos de energia. Apresentamos, no capítulo 4, resultados numéricos para o cálculo da taxa de dose absorvida, calculada pela formulação proposta no capítulo 3.

2. O MÉTODO LTS_N

2.1 Introdução

O método LTS_N [25], para a solução do problema de ordenadas discretas unidimensional (equações S_N), consiste, basicamente, na aplicação da transformada de Laplace na variável espacial (domínio finito), gerando um sistema de equações algébricas lineares para o fluxo angular transformado que, uma vez resolvido, resulta em uma expressão cuja transformada inversa pode ser obtida analiticamente, pelo uso da técnica de expansão de Heaviside.

A seguir descrevemos esses passos básicos que caracterizam a formulação, com mais detalhes, bem como a utilização das condições de contorno e o algoritmo utilizado para a inversão da matriz simbólica gerada pela aplicação da transformada de Laplace.

2.2 Formulação LTS_N

Consideremos o problema unidimensional de ordenadas discretas, um grupo de energia, em geometria plana,

$$\mu_m \frac{d}{dx} I_m(x) + \sigma_T I_m(x) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_m) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_k(x) \omega_k + S(x, \mu_m) \quad (2.2.1)$$

onde $m = 1, \dots, N$, N par, $0 \leq x \leq a$, sujeito às condições de contorno

$$I_m(0) = f_m, \mu_m > 0 \quad (2.2.1a)$$

e

$$I_m(a) = g_m, \mu_m < 0. \quad (2.2.1b)$$

Aqui, $I_m(x) \equiv I(x, \mu_m)$ representa o fluxo angular na direção μ_m , f_m e g_m representam o fluxo incidente nas fronteiras do domínio, σ_T é a seção de choque total, σ_{s_l} são as componentes de ordem l da seção de choque diferencial de espalhamento, $S_m(x) \equiv S(x, \mu_m)$ é o termo de fonte, ω_m são os pesos da quadratura de Gauss e μ_m são as raízes do Polinômio de Legendre de N -ésimo grau, ordenadas de forma que

$$-1 < \mu_n < \dots < \mu_{\frac{n}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{n}{2}} < \dots < \mu_2 < \mu_1 < 1 \quad . \quad (2.2.2)$$

A equação (2.2.1) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dx}I_m(x) + \frac{\sigma_T}{\mu_m}I_m(x) = \frac{c}{2\mu_m} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_m) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_k(x) \omega_k + Q_m(x) , \quad (2.2.3)$$

definindo

$$Q_m(x) = \frac{S_m(x)}{\mu_m} , \quad m = 1, \dots, N . \quad (2.2.4)$$

Aplicando a transformada de Laplace na variável x , à equação (2.2.3), obtemos

$$s\bar{I}_m(s) + \frac{\sigma_T}{\mu_m}\bar{I}_m(s) - \frac{c}{2\mu_m} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_m) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) \bar{I}_k(s) \omega_k = I_m(0) + \bar{Q}_m(s) \quad (2.2.5)$$

ou

$$\begin{aligned} s\bar{I}_m(s) + \frac{\sigma_T}{\mu_m}\bar{I}_m(s) - \frac{c}{2\mu_m} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_m) P_l(\mu_m) \bar{I}_m(s) \omega_m - \frac{c}{2\mu_m} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_m) \\ \times \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq m}}^N P_l(\mu_k) \bar{I}_k(s) \omega_k = I_m(0) + \bar{Q}_m(s) , \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

onde a barra representa a transformada de Laplace e $m = 1, \dots, N$. Assim, (2.2.6) representa um sistema de N equações lineares algébricas que pode ser escrito, matricialmente, como

$$\mathbf{A}_N(s)\bar{\mathbf{I}}(s) = \mathbf{I}(0) + \bar{\mathbf{Q}}(s), \quad (2.2.7)$$

sendo que a matriz $\mathbf{A}_N(s)$ é tal que

$$\mathbf{A}_N(s) = s\mathbf{I} + \mathbf{A}, \quad (2.2.8)$$

onde \mathbf{A} tem elementos

$$a_{ij} = \begin{cases} \frac{\sigma_T}{\mu_i} - \frac{c}{2\mu_i} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_i) P_l(\mu_i) \omega_i & \text{se } i = j \\ -\frac{c}{2\mu_i} \sum_{l=0}^L \sigma_{s_l} P_l(\mu_i) P_l(\mu_j) \omega_j & \text{se } i \neq j \end{cases}. \quad (2.2.9)$$

Ainda

$$\bar{\mathbf{I}}(s) = [\bar{I}_1(s), \dots, \bar{I}_N(s)]^T \quad (2.2.10)$$

e

$$\mathbf{I}(0) = [I_1(0), \dots, I_N(0)]^T, \quad (2.2.11)$$

que representa o vetor cujas componentes são os fluxos incidentes na fronteira $x = 0$ em todas as direções. Finalmente,

$$\bar{\mathbf{Q}}(s) = [\bar{Q}_1(s), \dots, \bar{Q}_N(s)]^T \quad . \quad (2.2.12)$$

Conhecida a matriz inversa de $\mathbf{A}_N(s)$, que denotaremos por $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$, a partir da equação (2.2.7) obtemos o fluxo angular transformado,

$$\bar{\mathbf{I}}(s) = \mathbf{A}_N^{-1}(s)\mathbf{I}(0) + \mathbf{A}_N^{-1}(s)\bar{\mathbf{Q}}(s) \quad , \quad (2.2.13)$$

e, uma vez aplicada a transformada inversa de Laplace, resulta que o fluxo angular pode ser determinado como

$$\mathbf{I}(x) = \mathfrak{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\mathbf{I}(0)\} + \mathfrak{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\bar{\mathbf{Q}}(s)\} \quad . \quad (2.2.14)$$

Ou ainda, usando as propriedades da transformada de Laplace,

$$\mathbf{I}(x) = \mathbf{B}(x)\mathbf{I}(0) + \mathbf{B}(x) * \mathbf{Q}(x) \quad , \quad (2.2.15)$$

sendo que o símbolo $*$ denota a convolução.

$$\mathbf{B}(x) * \mathbf{Q}(x) = \int_0^x \mathbf{B}(x - \tau) \mathbf{Q}(\tau) d\tau , \quad (2.2.16)$$

com

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\} . \quad (2.2.17)$$

Como foi citado anteriormente, o conhecimento da matriz $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$ é fundamental para a determinação da expressão do fluxo desejado. Baseada na definição da matriz inversa, foi obtida [14] uma expressão analítica para a mesma, na forma

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = \frac{s^{N-1}\mathbf{P}_{N-1} + s^{N-2}\mathbf{P}_{N-2} + \dots + s\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_0}{\det \mathbf{A}_N(s)} , \quad (2.2.18)$$

onde as matrizes \mathbf{P} , de ordem N , estão definidas em [14].

Como pode ser visto em (2.2.18), os elementos de $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$ são quocientes de polinômios e, então, pela fórmula de expansão de Heaviside, podemos inverter analiticamente, a transformada de Laplace, obtendo a solução final para a equação (2.2.15) na forma

$$\mathbf{I}(x) = \mathbf{G}(x) + \mathbf{B}(x) * \mathbf{Q}(x) . \quad (2.2.19)$$

onde

$$\mathbf{G}(x) = \mathbf{B}(x)\mathbf{I}(0) = \sum_{k=1}^N \beta_k e^{s_k x}, \quad (2.2.20)$$

com

$$\beta_k = \left[\frac{s_k^{N-1} \mathbf{P}_{N-1} + s_k^{N-2} \mathbf{P}_{N-2} + \dots + s_k \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_0}{\frac{d}{ds} [\det \mathbf{A}_N(s)]_{s=s_k}} \right] \mathbf{I}(0), \quad (2.2.21)$$

vetor de ordem N , onde s_k são as raízes do determinante de $\mathbf{A}_N(s)$, que também podem ser calculados como autovalores da matriz $-\mathbf{A}$, dada em (2.2.8).

Nesse ponto é importante salientar que o vetor $\mathbf{I}(0)$ que aparece na equação (2.2.7) tem apenas suas $N/2$ primeiras componentes conhecidas, dadas pela condição de contorno (2.2.1a). É necessária a aplicação da condição de contorno (2.2.1b) em $x = a$, na equação (2.2.19), para a determinação das $N/2$ componentes restantes, até aqui desconhecidas, ficando, assim, completamente estabelecida a solução.

Dessa forma, já que nenhuma aproximação é usada ao longo da derivação da solução, podemos dizer que uma solução analítica fica determinada para o problema de ordenadas discretas unidimensional.

É preciso que salientemos aqui que as exponenciais envolvidas na expressão (2.2.20), para valores grandes de N , bem como para grandes espessuras da placa, podem ocasionar problemas computacionais de overflow, uma vez que, neste caso,

apresentam as raízes s_k de grande valor absoluto. Para solucionar este problema, foi desenvolvida por Barichello et al. [5] uma mudança de base e a equação (2.2.20) foi reescrita como

$$\mathbf{G}^*(x) = \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} \left[\beta_k e^{-s_k(a-x)} + \beta_{k+\frac{N}{2}} e^{-s_k x} \right], \quad s_k > 0. \quad (2.2.22)$$

Este procedimento tem-se mostrado bem mais vantajoso, computacionalmente.

Salientamos ainda que, à medida que o valor de N cresce, digamos, $N > 20$, a expressão (2.2.18), avaliada segundo [4], torna-se inviável, computacionalmente. Assim, na seção a seguir, apresentamos uma nova abordagem para a inversão da matriz $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$, proposta recentemente por Brancher [7], que vem obtendo resultados satisfatórios para problemas com N até 390 [20].

2.3 Inversão da matriz $\mathbf{A}_N(s)$

Consideremos a matriz

$$\mathbf{A}_N(s) = s\mathbf{I} + \mathbf{A}, \quad (2.3.1)$$

cuja inversa,

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}, \quad (2.3.2)$$

desejamos determinar. Aplicamos à matriz \mathbf{A} , a fatoração de Schur [22], segundo a qual, para qualquer matriz quadrada \mathbf{A} , existe uma matriz unitária \mathbf{U} tal que o produto $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U} = \mathbf{T}$ é uma matriz triangular superior. Podemos, então, escrever

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T \quad (2.3.3)$$

e, substituindo (2.3.3) em (2.3.2), temos

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{U}\mathbf{U}^T + \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T)^{-1} \quad (2.3.4)$$

ou

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (\mathbf{U}(s\mathbf{I} + \mathbf{T})\mathbf{U}^T)^{-1} \quad (2.3.5)$$

ou ainda

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (\mathbf{U}^T)^{-1}(s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1}\mathbf{U}^{-1} . \quad (2.3.6)$$

Finalmente,

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = \mathbf{U}(s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1}\mathbf{U}^T \quad (2.3.7)$$

onde a matriz $s\mathbf{I} + \mathbf{T}$ tem a forma

$$s\mathbf{I} + \mathbf{T} = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ 0 & s + t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + t_{NN} \end{bmatrix} \quad (2.3.8)$$

e podemos observar que

$$\Delta_N \equiv \det(s\mathbf{I} + \mathbf{T}) = \prod_{u=1}^N (s + t_{uu}) . \quad (2.3.9)$$

Com o objetivo de determinar a inversa da matriz $(s\mathbf{I} + \mathbf{T})$, definimos

$$\mathbf{S}_1 \equiv [s + t_{11}] , \quad (2.3.10)$$

$$\mathbf{S}_2 \equiv \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix} , \quad (2.3.10a)$$

$$\mathbf{S}_3 \equiv \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ 0 & s + t_{22} & t_{23} \\ 0 & 0 & s + t_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{S}_2 \\ \end{bmatrix} & t_{13} \\ & t_{23} \\ 0 & 0 & s + t_{33} \end{bmatrix} , \quad (2.3.10b)$$

de forma que, genericamente,

$$\mathbf{S}_k \equiv \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & t_{13} & \cdots & t_{1k} \\ 0 & s + t_{22} & t_{23} & \cdots & t_{2k} \\ 0 & 0 & s + t_{33} & \cdots & t_{3k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & s + t_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & t_{1k} \\ & & & & t_{2k} \\ & \mathbf{S}_{k-1} & & & t_{3k} \\ & & & & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & s + t_{kk} \end{bmatrix} , \quad (2.3.10c)$$

onde $\mathbf{S}_k \equiv s\mathbf{I} + \mathbf{T}$ e $k = 1, 2, \dots, N$. Usamos, então a propriedade de matrizes em bloco:

$$\begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} B^{-1} & -B^{-1}CD^{-1} \\ 0 & D^{-1} \end{bmatrix} \quad (2.3.11)$$

obtendo a inversa da matriz \mathbf{S}_k que pode ser representada por

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & -\frac{\mathbf{S}_{k-1}^{-1} \mathbf{v}}{s + t_{kk}} \\ \hline 0 \cdots 0 & \frac{1}{s + t_{kk}} \end{array} \right] \quad (2.3.12)$$

e o vetor \mathbf{v} é dado por

$$\mathbf{v} = [t_{1k} \ t_{2k} \ \cdots \ t_{(k-1)k}]^T. \quad (2.3.13)$$

Dessa forma, temos, determinada, a matriz $\mathbf{A}_N^{-1}(s)$, definida em (2.3.7).

Para efetuarmos a inversão da transformada de Laplace da matriz $s\mathbf{I} + \mathbf{T}$, determinamos sua matriz adjunta, multiplicando as equações (2.3.12) e (2.3.9), usando a definição de matriz inversa e obtendo

$$Adj(\mathbf{S}_k) = \mathbf{S}_k^{-1} \det(\mathbf{S}_k) = \left[\begin{array}{c|c} Adj(\mathbf{S}_{k-1})(s + t_{kk}) & -Adj(\mathbf{S}_{k-1})\mathbf{v} \\ \hline 0 \ \dots & 0 \ \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{array} \right] . \quad (2.3.14)$$

Finalmente, usamos a técnica de expansão de Heaviside, encontrando a expressão para a transformada inversa da inversa da matriz $\mathbf{A}_N(s)$

$$\mathfrak{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\} = \mathfrak{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1}\} = \mathbf{U}\mathfrak{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1}\}\mathbf{U}^T \quad (2.3.15)$$

ou

$$\mathfrak{L}^{-1}\{\mathbf{A}_N^{-1}(s)\} = \mathbf{U} \left[\sum_{l=1}^N \frac{Adj(\mathbf{S}_N)|_{t_{ll}}}{\frac{d}{ds}(\Delta_u)|_{t_{ll}}} e^{t_{ll}x} \right] \mathbf{U}^T . \quad (2.3.16)$$

Esse algoritmo recursivo possibilita a inversão da matriz simbólica de ordem N , para valores grandes de N .

Relativamente ao método LTS_N , é importante ainda salientar que a convergência da solução LTS_N , foi provada a partir da teoria de semi-grupos, por Pazos e Vilhena [15].

No próximo capítulo apresentamos uma proposta de aplicação do método LTS_N aqui descrito, para a solução da equação de transporte multigrupo, escrita em termos de comprimento de onda do fóton.

3. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL PARA VALORES DISCRETOS DE ENERGIA COM NÚCLEO DE KLEIN-NISHINA

3.1 Introdução

Neste capítulo propomos uma solução para a equação de transporte multigrupo com núcleo de Klein-Nishina, escrita em termos do comprimento de onda λ [Ver Apêndice B]. A proposta se baseia na discretização do termo integral relativo à dependência da energia, resultando na obtenção dos fluxos angulares para valores discretos de energia. O sistema de equações resultante é, então, resolvido pelo método LTS_N . Duas aproximações são utilizadas para o termo da integral em energia: quadratura de Gauss [16] e regra de Simpson [1].

3.2 Formulação

Consideremos a equação de transporte dependente da energia, escrita em termos de comprimento de onda do fóton, λ , independente do tempo, sem fonte externa (apêndice B)

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_0^\lambda \widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) I(x, \lambda', \mu') d\Omega' d\lambda' , \quad (3.2.1)$$

com fluxo angular de energia $I(x, \lambda, \mu)$ conhecido nas fronteiras. Aqui, $\sigma(\lambda)$ representa o coeficiente de atenuação e o núcleo de espalhamento é escrito como

$$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) \quad , \quad (3.2.2)$$

onde $\mu_0 = \Omega' \cdot \Omega$ é o co-seno do ângulo de espalhamento:

$$\mu_0 = \mu\mu' + \sqrt{(1-\mu^2)} \cdot \sqrt{(1-\mu'^2)} \cdot \cos(\phi - \phi') \quad . \quad (3.2.3)$$

Observamos, em (3.2.2), que o núcleo de espalhamento é escrito desta forma, porque podemos assumir o espalhamento de fótons como não polarizado[28] e, conseqüentemente, a probabilidade de espalhamento não depende das direções iniciais e finais da partícula, mas somente do ângulo de espalhamento e das energias incidente e final; as variáveis λ e λ' são, respectivamente, o comprimento de onda do fóton espalhado e do fóton incidente[28].

Substituindo (3.2.2) em (3.2.1) resulta

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) \\ &= \int_{4\pi} \int_0^\lambda \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\Omega' \quad . \quad (3.2.4) \end{aligned}$$

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

$$P_l(\mu_0) = P_l(\mu)P_l(\mu') + \text{termos contendo } \cos u(\phi - \phi') , u = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.5)$$

obtendo, no lado direito da equação (3.2.4),

$$\begin{aligned} & \int_{4\pi} \int_0^\lambda \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\Omega' \\ &= \int_{-1}^1 \int_0^\lambda \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) I(x, \lambda', \mu') P_l(\mu) P_l(\mu') d\lambda' d\mu' . \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Substituindo o resultado encontrado em (3.2.6), na equação (3.2.4) , a equação para o fluxo angular resulta

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \int_0^\lambda \widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) \\ &\times P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' . \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

O núcleo de espalhamento em (3.2.1) pode ser relacionado com a seção de choque de Klein-Nishina para o espalhamento Compton [28], $K(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega)$ pela expressão

$$\widehat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) = \frac{\lambda}{\lambda'} K(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) \quad (3.2.8)$$

onde

$$K(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] \\ \times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \Omega' \cdot \Omega) , \quad (3.2.8a)$$

com α (constante dependente do meio) determinada por

$$\alpha = \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T = 0,40061 \frac{Z \rho}{A} [cm^{-1}] , \quad (3.2.8b)$$

N_A , o n° de Avogadro ($6,02 \times 10^{23}/mol$), Z , A e ρ , respectivamente, o número atômico, a massa atômica e a densidade do meio;

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 = 6,65245 \times 10^{-25} cm^2 \quad (3.2.8c)$$

a secção de choque de Thomson e ,em (3.2.8a), a função delta de Dirac indica que,

para cada comprimento de onda, existe apenas um ângulo espalhado, ou seja

$$\lambda - \lambda' = 1 - \Omega' \cdot \Omega \quad . \quad (3.2.8d)$$

Desta forma, o núcleo de espalhamento em (3.2.7) é tal que

$$\widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) = \frac{3 N_A Z \rho}{8 A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] P_l(1 + \lambda' - \lambda) \quad (3.2.9)$$

ou ainda

$$\widehat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) = \alpha K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) \quad , \quad (3.2.10)$$

onde

$$K(\lambda', \lambda) = \begin{cases} \frac{3 \lambda'}{8 \lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} + 2(\lambda' - \lambda) + (\lambda' - \lambda)^2 \right] & \text{para } \lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2 \\ 0 & \text{para } \lambda \notin [\lambda'; \lambda' + 2] \quad . \end{cases} \quad (3.2.11)$$

Finalmente, substituindo (3.2.10) em (3.2.7) obtemos

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) \\ \times P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' . \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

A integral em λ , na equação (3.2.12) é calculada desde o limite máximo de energia para o fóton, λ_0 , até o limite mínimo de energia, $\lambda_0 + 2$. O comprimento de onda λ_0 , adimensional, está relacionado com a energia do fóton pela relação [28],

$$\lambda_0 = \frac{0,511}{E_0[\text{MeV}]} , \quad (3.2.13)$$

onde E_0 é a energia incidente no meio.

Propomos, nesse ponto, a aproximação do termo integral em λ , que aparece na equação (3.2.12), resultando em soluções para cada valor de energia. Assim sendo, apresentamos, a seguir, duas formas distintas para o tratamento da integral em questão, quais sejam, a regra de Simpson [1] e a quadratura de Gauss [16].

3.3 Cálculo da integral em λ pela regra de Simpson

Usando a Regra de Simpson, como foi descrita no Apêndice C1, para aproximar a integral em λ , contida na equação (3.2.12) podemos escrever

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \\ &= \frac{\Delta}{3} \sum_{r=1}^{m+1} c_r \alpha K(\lambda_r, \lambda) P_l(1 + \lambda_r - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_r, \mu') d\mu' \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

onde m é o número (par) de subintervalos do intervalo (λ_0, λ_0+2) , sendo $M = m+1$, o número de energias considerado; além disso,

$$\Delta = \frac{2}{m}, \quad (3.3.1a)$$

$$c_1 = c_{m+1} = 1 \quad e \quad c_r = \begin{cases} 4 \text{ se } r \text{ é par} \\ 2 \text{ se } r \text{ é ímpar} \end{cases}, \quad (3.3.1b)$$

$$\lambda_r = \lambda_0 + k \cdot \Delta, \quad k \in \mathbf{Z}. \quad (3.3.1c)$$

Assim, para cada um dos valores discretos de energia λ_j , usando a notação simplificada $K(\lambda_r, \lambda_j) \equiv K_{rj}$ e $I(x, \lambda_r, \mu') \equiv I_r(x, \mu')$ e substituindo em (3.2.12) o resultado obtido em (3.3.1), temos

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) &= \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) \\ &\times P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') d\mu' \quad , \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

$j = 1, \dots, M$. Segundo o tratamento proposto à variável λ , o sistema resultante depende agora das variáveis x e μ . Aproximamos, então, o termo integral na equação (3.3.2), por quadratura de Gauss. Assim

$$\begin{aligned} \mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu_n) + \sigma_j I_j(x, \mu_n) &= \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) \\ &\times P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_r(x, \mu_k) w_k \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

ou

$$\begin{aligned} \mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_{jn}(x) + \sigma_j I_{jn}(x) &= \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) \\ &\times P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_{rk}(x) w_k \quad , \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

onde w_k são os pesos da quadratura de Gauss.

A equação (3.3.4) é a aproximação S_N para a equação (3.3.2). Nesse ponto, então, aplicamos o método LTS_N para solução do sistema resultante. Assim sendo, a transformada de Laplace, na variável x , aplicada à equação (3.3.4), resulta no sistema de equações algébricas que representamos por

$$s\bar{I}_{jn}(s) + \frac{\sigma_j}{\mu_n}\bar{I}_{jn}(s) - \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \\ \times \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) \omega_k \bar{I}_{rk}(s) = I_{jn}(0) , \quad (3.3.5)$$

com $j = 1, 2, \dots, M$ e $n = 1, 2, \dots, N$. Devido à característica do núcleo de espalhamento, $K_{ij} = 0$ se $i > j$, conforme (3.2.11), assim a equação (3.3.5) representa um conjunto de M sistemas de ordem N , cuja solução representa o fluxo angular para cada um dos M valores de energia considerados, calculados nas N direções discretas. O sistema pode ser representado, matricialmente, por

$$\mathbf{A}_j(s)\bar{\mathbf{I}}_{jn}(s) = \mathbf{I}_{jn}(0) + \bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s) , \quad (3.3.6)$$

onde os elementos da matriz $\mathbf{A}_j(s)$, $(N \times N)$, para cada valor de energia, j , têm a forma

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\sigma_j}{\mu_p} - \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (3.3.7a)$$

Além disso

$$\bar{\mathbf{I}}_{jn}(s) = \left[\bar{I}_{j1}(s) \quad \bar{I}_{j2}(s) \quad \cdots \quad \bar{I}_{jN}(s) \right]^T, \quad (3.3.7b)$$

$$\mathbf{I}_{jn}(0) = \left[\bar{I}_{j1}(0) \quad \bar{I}_{j2}(0) \quad \cdots \quad \bar{I}_{jN}(0) \right]^T, \quad (3.3.7c)$$

e

$$\bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s) = \sum_{i=1}^{j-1} \mathbf{H}_i \bar{\mathbf{I}}_{in}(s), \quad (3.3.7d)$$

vetor, de ordem N , dependente do parâmetro s , é a soma dos produtos de matrizes \mathbf{H}_i pelas soluções já obtidas nos estágios anteriores. O vetor $\bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s)$ representa o termo de espalhamento transformado, para a energia $j - 1$, sendo nulo para o primeiro valor de energia. A matriz constante \mathbf{H}_i tem, para cada valor de i , elementos

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) \omega_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_l(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (3.3.7e)$$

Assim, a solução da equação (3.3.6) tem a forma

$$\bar{\mathbf{I}}_{jn}(s) = \mathbf{A}_j^{-1}(s) \mathbf{I}_{jn}(0) + \mathbf{A}_j^{-1}(s) \bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s) \quad , \quad (3.3.8)$$

sendo obtida de forma recursiva. Para cada valor de energia j , pode ser escrita como

$$\bar{\mathbf{I}}_{1n}(s) = \mathbf{A}_1^{-1}(s) \mathbf{I}_{1n}(0) \quad ,$$

$$\bar{\mathbf{I}}_{2n}(s) = \mathbf{A}_2^{-1}(s) \mathbf{I}_{2n}(0) + \mathbf{A}_2^{-1}(s) \bar{\mathbf{Z}}_2(s) = \mathbf{A}_2^{-1}(s) \mathbf{I}_{2n}(0) + \mathbf{A}_2^{-1}(s) \mathbf{H}_1 \bar{\mathbf{I}}_{1n}(s) \quad ,$$

$$\bar{\mathbf{I}}_{3n}(s) = \mathbf{A}_3^{-1}(s) \mathbf{I}_{3n}(0) + \mathbf{A}_3^{-1}(s) \bar{\mathbf{Z}}_3(s) \quad ,$$

ou

$$\bar{\mathbf{I}}_{3n}(s) = \mathbf{A}_3^{-1}(s) \mathbf{I}_{3n}(0) + \mathbf{A}_3^{-1}(s) [\mathbf{H}_1 \bar{\mathbf{I}}_{1n}(s) + \mathbf{H}_2 \bar{\mathbf{I}}_{2n}(s)] \quad ,$$

e assim, sucessivamente, até a energia M .

A transformada inversa de Laplace, aplicada à equação (3.3.8) nos dá o fluxo angular de energia, em função de x , para a energia j , na direção n , isto é,

$$\mathbf{I}_{jn}(x) = \mathfrak{L}^{-1} \{ \mathbf{A}_j^{-1}(s) \mathbf{I}_{jn}(0) \} + \mathfrak{L}^{-1} \{ \mathbf{A}_j^{-1}(s) \bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s) \} \quad . \quad (3.3.9)$$

Obtida a matriz inversa $A_j^{-1}(s)$, a transformada inversa do primeiro termo do segundo membro da equação (3.3.9), pode ser obtida através da técnica de expansão de Heaviside e para o segundo termo, usamos a propriedade da convolução, como descrito em (2.2.16) ou também a técnica de expansão de Heaviside; consequentemente, o fluxo angular de energia será dado por

$$\mathbf{I}_{jn}(x) = \sum_{k=1}^N \beta_k e^{s_k x} + \mathbf{Z}_{j-1}(x) * \mathfrak{L}^{-1}\{A_j^{-1}(s)\} , \quad (3.3.10)$$

onde β_k tem a mesma forma descrita em (2.2.21) e

$$\mathbf{Z}_{j-1}(x) = \mathbf{H}_i \mathbf{I}_{j-1,n}(x) , \quad (3.3.11)$$

com \mathbf{H}_i de elementos dados por (3.3.7b).

As componentes desconhecidas do vetor $\mathbf{I}_{jn}(0)$ serão obtidas, conforme descrito no capítulo 2.2 e a inversão da matriz A_j segue o mesmo algoritmo proposto em 2.3, uma vez que, também aqui, a matriz simbólica só contém o parâmetro s na diagonal principal.

3.4 Cálculo da integral em λ usando a Quadratura de Gauss

Numa abordagem diferenciada, aproximamos o termo integral em λ , contido na equação (3.2.12), por Quadratura de Gauss.

Assim sendo, usamos, de acordo com (C2.4), a seguinte mudança de variável:

$$\lambda_* = \lambda - \lambda_0 - 1, \quad (3.4.1)$$

e, conseqüentemente, $d\lambda_* = d\lambda$, de forma que a integral em questão, pode ser aproximada por

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \\ &= \int_{-1}^1 \alpha K(\lambda'_*, \lambda_*) P_l(1 + \lambda'_* - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda'_*, \mu') d\mu' d\lambda'_* \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

e, de acordo com a fórmula (C2.1),

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \alpha K(\lambda'_*, \lambda_*) P_l(1 + \lambda'_* - \lambda_*) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda'_*, \mu') d\mu' d\lambda'_* \\ &= \sum_{r=1}^M \alpha K(\lambda_{*r}, \lambda_{*j}) P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu) w_r \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda_{*r}, \mu') d\mu' \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

ou

$$\begin{aligned} & \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_l(1 + \lambda' - \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \\ &= \sum_{r=1}^M \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') w_r d\mu' \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

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

Desta forma, a equação (3.2.12) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu) \\ &\times \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(x, \mu') w_r d\mu'. \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

cuja aproximação em ordenadas discretas é dada por

$$\begin{aligned} & \mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu_n) + \sigma_j I_j(x, \mu_n) \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_r(x, \mu_k) w_r \omega_k \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

ou

$$\begin{aligned} & \mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_{jn}(x) + \sigma_j I_{jn}(x) \\ &= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_{rk}(x) w_r \omega_k \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

onde w_r são os pesos da quadratura de Gauss para a energia e ω_k são os pesos da quadratura usada na variável angular (LTS_N).

Como na secção 3.3, propomos a solução de (3.4.7) pelo método LTS_N , aplicando a Transformada de Laplace, na variável x , à equação (3.4.7), obtendo

$$\begin{aligned} s \bar{I}_{jn}(s) + \frac{\sigma_j}{\mu_n} \bar{I}_{jn}(s) - \frac{1}{\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M \alpha K_{rj} P_l(1 + \lambda_{*r} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_n) \\ \times \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) \bar{I}_{rk}(s) w_r \omega_k = I_{jn}(0) \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

onde $j = 1, 2, \dots, M$ e $n = 1, 2, \dots, N$. A equação (3.4.8) representa um conjunto de M sistemas de equações lineares algébricas, de ordem N , com as mesmas características daquela representada pela equação (3.3.5), onde a integral em λ foi aproximada pela Regra de Simpson. Assim, considerando a equação (3.3.6) como a representação matricial da equação (3.4.8), isto é

$$\mathbf{A}_j(s)\bar{\mathbf{I}}_{jn}(s) = \mathbf{I}_{jn}(0) + \bar{\mathbf{Z}}_{j-1}(s) , \quad (3.4.9)$$

temos, agora, para cada valor de energia, j , os elementos da matriz $\mathbf{A}_j(s)$ definidos genericamente por

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\sigma_j}{\mu_p} - \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha K_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) w_j \omega_q & \text{se } p = q \\ -\frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha K_{jj} P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) w_j \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (3.4.10a)$$

e os elementos da matriz constante \mathbf{H}_i , dados por

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha K_{ij} P_l(1 + \lambda_{*i} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_p) P_l(\mu_p) w_j \omega_q & \text{se } p = q \\ \frac{1}{\mu_p} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \alpha K_{ij} P_l(1 + \lambda_{*i} - \lambda_{*j}) P_l(\mu_p) P_l(\mu_q) w_j \omega_q & \text{se } p \neq q \end{cases} . \quad (3.4.10b)$$

A transformada inversa de Laplace é, então, aplicada, e a solução é obtida seguindo o formalismo apresentado no capítulo 3.3, uma vez que ambas as aproximações não resultam em matrizes significativamente diferentes.

No próximo capítulo apresentamos alguns resultados numéricos para a taxa de dose absorvida [11], calculados em função do fluxo escalar, obtido a partir das propostas apresentadas nesse capítulo, e do coeficiente de absorção do meio material.

4. RESULTADOS NUMÉRICOS : UMA APLICAÇÃO AO CÁLCULO DE DOSE

4.1 Descrição Geral

A dose absorvida de qualquer radiação ionizante é a quantidade de energia cedida à matéria pelas partículas ionizantes por unidade de massa [11]. Neste capítulo, usamos a formulação proposta no capítulo 3 para o cálculo da taxa de dose absorvida [23], obtida em função do fluxo escalar e do coeficiente de absorção do meio material, por

$$D_T(x) = \sum_{i=0}^M \mu_{a_i} E_i \Psi_i(x, \lambda_i) \quad , \quad (4.1.1)$$

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

$$\mu_{a_i} \equiv \mu_a(\lambda_i) \quad , \quad (4.1.1a)$$

$$E_i = \frac{0,511}{\lambda_i} \quad , \quad (4.1.1b)$$

e, para a qual, o fluxo escalar, dado por

$$\Psi_i(x) \equiv \Psi(x, \lambda_i) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda_i, w) dw, \quad (4.1.1c)$$

foi calculado usando a formulação descrita no capítulo 3.

Mais precisamente, calculamos o fluxo escalar para cada nível de energia, através da aproximação da integral em energia pela regra de Simpson, usando a fórmula 3.3.5, desenvolvida conforme descrito no capítulo 3.3. De forma análoga, calculamos o fluxo escalar para cada valor de energia, com aproximação da integral em energia pela quadratura de Gauss, usando a fórmula 3.4.8, desenvolvida conforme descrito no capítulo 3.4.

É comum nos referirmos à dose devido ao fluxo não espalhado, que é simplesmente a primeira componente da soma da equação (4.1.1) [23]:

$$D_0(x) = \mu_{a0} E_0 \Psi(x, \lambda_0) . \quad (4.1.2)$$

onde E_0 é a energia incidente no meio e os outros fatores no somatório dado em (4.1.1) compõem a dose devido ao fluxo espalhado. Os parâmetros aqui empregados são apresentados no Apêndice C.

Fizemos toda a implementação computacional usando o software Maple. Assim sendo, os procedimentos como determinação da matriz inversa, inversão de Laplace, cálculo de autovalores, foram executados usando os recursos do próprio software. Dessa forma, apesar de apresentarmos resultados para até 5 energias, usamos apenas a aproximação LTS_2 . A dificuldade que surge quanto ao aumento do número de energias, bem como do número de pontos de quadratura, o que implica num aumento do grau de anisotropia, é devida às limitações do próprio software. Principalmente no que diz respeito ao termo de fonte, representado pela matriz $\bar{Z}_{j-1}(s)$ nas equações (3.3.6) e (3.4.9).

Uma vez que um algoritmo para uso desse método está sendo desenvolvido para valores grandes de N , em futuros trabalhos, resultados mais precisos poderão ser obtidos.

4.2 Aplicações

Para análise da formulação proposta, algumas aplicações foram implementadas [23]. Primeiro, calculamos o fluxo escalar em uma camada d'água [18] de 20cm de espessura, considerando um feixe de fótons com uma energia inicial de 2MeV incidindo na superfície $x = 0$ da mesma, com as seguintes condições de contorno:

$$I(0, \lambda_1, \mu) = 1 \text{ para } 0 < \mu \leq 1 ; \quad (4.2.1)$$

$$I(0, \lambda_i, \mu) = 0 \text{ para } 0 < \mu \leq 1 \text{ e } i = 2, 3, \dots, M ; \quad (4.2.2)$$

$$I(20, \lambda_i, \mu) = 0 \text{ para } -1 \leq \mu < 0 \text{ e } i = 1, 2, \dots, M . \quad (4.2.3)$$

Obtivemos resultados numéricos para 4 e 5 valores de energia ($M = 4$ e $M = 5$), com 2 pontos de quadratura. Em cada caso foi calculada a taxa de dose absorvida (4.1.1) e a dose devido ao fluxo não espalhado (4.1.2).

Calculamos, assim, com aproximação por quadratura de Gauss, o fluxo escalar para quatro valores de energia, a partir de uma energia inicial de 2Mev , obtendo os resultados que apresentamos na tabela 4.1 .

Tabela 4.1. Fluxo Escalar para quatro valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss.

$x(\text{cm})$	$\Psi_1(x)$	$\Psi_2(x)$	$\Psi_3(x)$	$\Psi_4(x)$
0	1.000000	0.102191	0.283986	0.384036
10	0.716755	0.226769	0.330714	0.543713
20	0.513738	0.277623	0.236943	0.267915

Os resultados obtidos na tabela 4.1 podem ser visualizados na figura abaixo.

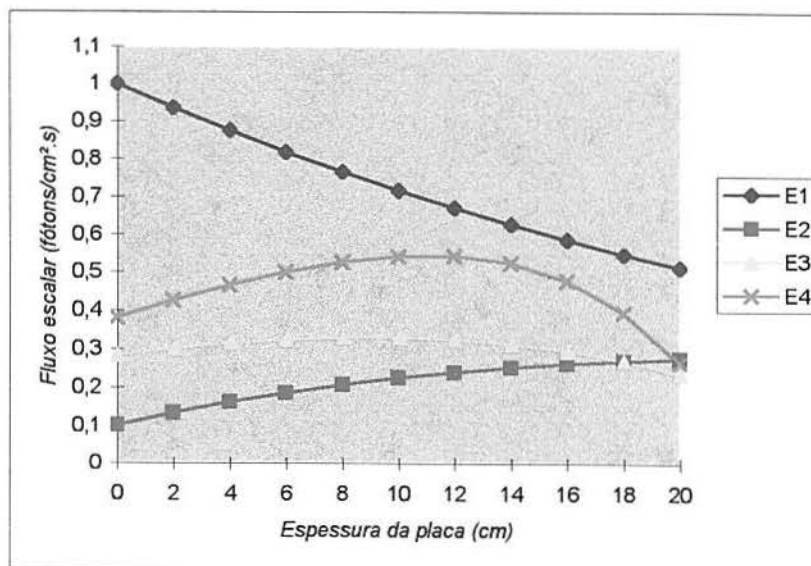


Figura 4.1. Fluxo escalar para cada um dos quatro valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss.

Para verificar o comportamento qualitativo da taxa de dose absorvida em função da posição, esta foi representada graficamente em função da posição, na figura 4.2. A unidade de dose absorvida é o *Gray* (*Gy*), definido por :

$$1Gy = 1J.Kg^{-1}.$$

Ainda podemos usar o *rad*, que equivale a:

$$1rad = 10^{-2}J.Kg^{-1} ,$$

e se aplica a qualquer tipo de radiação e a qualquer meio material [12].

No presente trabalho, usamos a constante $C = 0,05767[cm^3.s/MeV]$, fator que converte a taxa de dose em *mrads/h*, para o fluxo escalar em $[fótons/cm^2.s]$ [23].

Devido à dificuldade de obtenção de resultados numéricos para comparação, destacamos, na figura 4.2, o comportamento exponencial esperado, no caso da dose devido ao fluxo não espalhado.

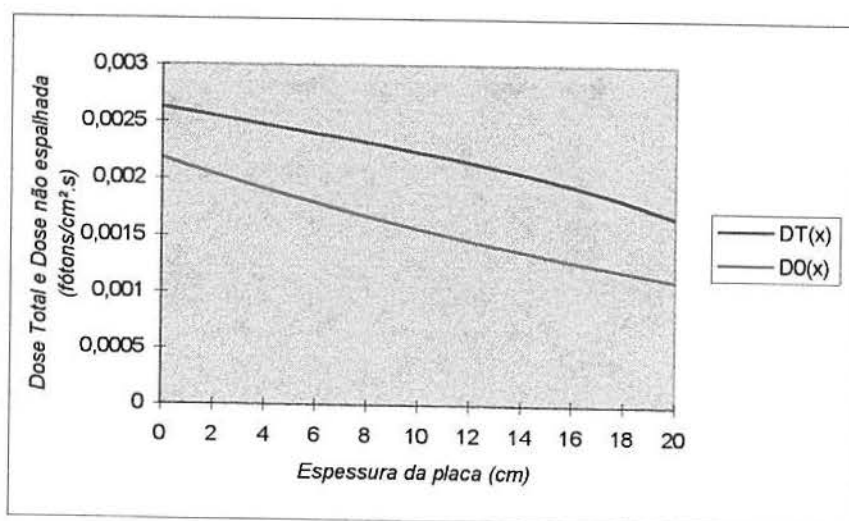


Figura 4.2. Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, em função da posição, para quatro valores de energia e aproximação por quadratura de Gauss.

A seguir, o mesmo problema foi abordado, agora tomando cinco valores discretos de energia, com os resultados dispostos na tabela 4.2, e graficamente na figura 4.3.

É claro que um maior número de valores de energias considerado, corresponde a um maior número de sistemas a serem resolvidos, cuja solução representa o fluxo escalar para cada um deles. A ordem N de cada sistema corresponde ao grau de quadratura empregado e, evidentemente, é a mesma para cada sistema envolvido.

A dificuldade que surge, a partir da resolução do segundo sistema, é quanto à função convolução, que se torna mais complexa, a cada nível de energia, ainda que para isso, possamos empregar a técnica de expansão de Heaviside para a inversão.

Tabela 4.2. Fluxo escalar para cinco valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss.

$x(\text{cm})$	$\Psi_1(x)$	$\Psi_2(x)$	$\Psi_3(x)$	$\Psi_4(x)$	$\Psi_5(x)$
0	1.000000	$4.74424 - E02^1$	0.114762	0.168789	0.183402
10	0.706799	0.158790	0.160366	0.178381	0.186203
20	0.499565	0.195778	0.152624	0.105695	$7.19052 - E02$

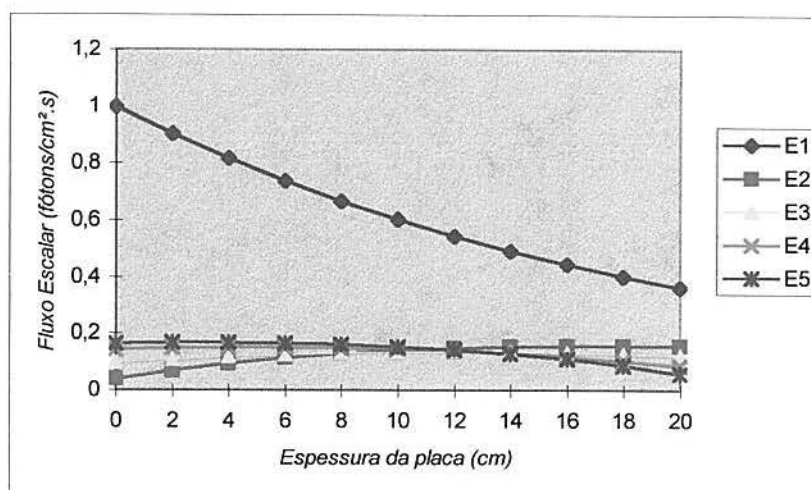


Figura 4.3. Fluxo escalar para cada um dos cinco valores de energia, com aproximação por quadratura de Gauss.

¹ $4.74424 - E02 = 0.0474424$

Na figura 4.4, o comportamento exponencial da dose devido ao fluxo não espalhado fica ainda mais caracterizado. É importante salientar que esses resultados concordam plenamente (ordem de grandeza) com os apresentados graficamente por Trindade [23] para o mesmo problema.

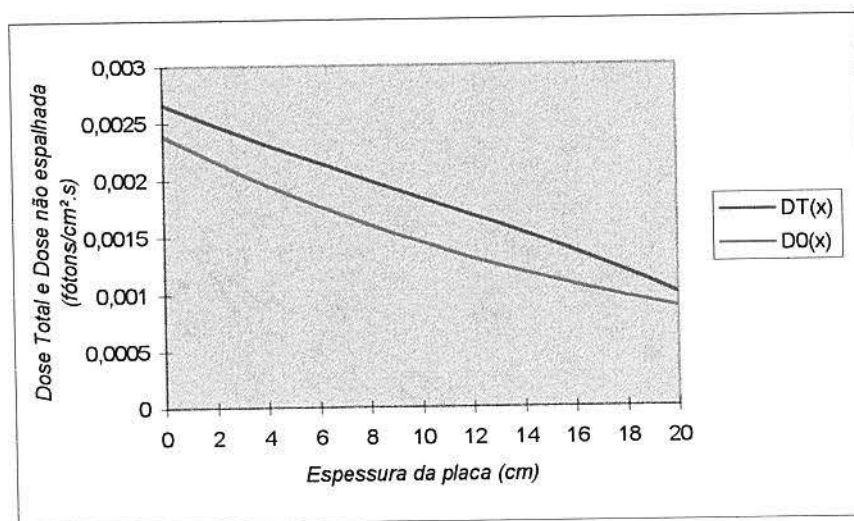


Figura 4.4. Taxa de Dose Total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado para cinco valores de energia e aproximação por quadratura de Gauss.

A aproximação da integral usando a regra de Simpson também foi testada, com $M = 5$ e os resultados são apresentados na Tabela 4.3 .

Tabela 4.3. Fluxo escalar para cinco valores de energia, com aproximação por Simpson.

$x(\text{cm})$	$\Psi_1(x)$	$\Psi_2(x)$	$\Psi_3(x)$	$\Psi_4(x)$	$\Psi_5(x)$
0	1.000000	$4.69924 - E02$	$5.76616 - E02$	0.138808	0.125768
10	0.608155	0.106751	$8.43184 - E02$	0.125396	0.118513
20	0.369852	0.139113	0.069425	$7.81669 - E02$	$3.85271 - E02$

Na figura a seguir, estes resultados podem ser observados.

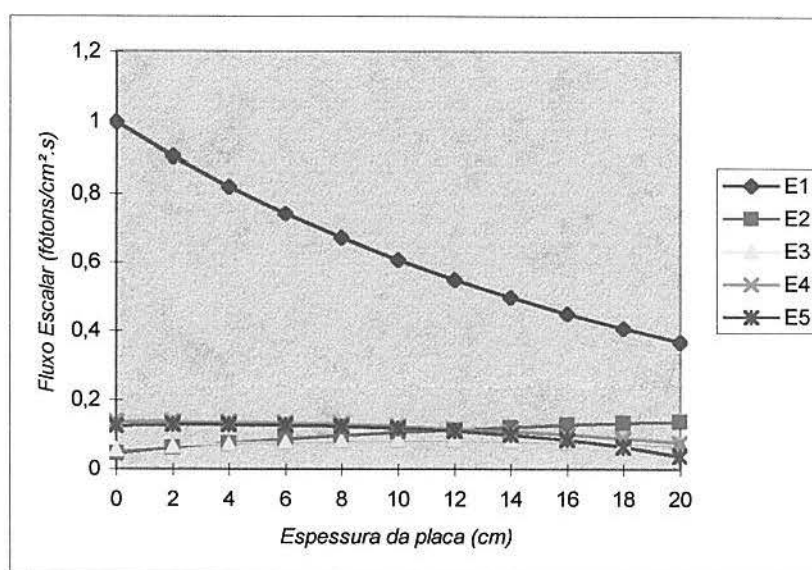


Figura 4.5. Fluxo escalar para cada um dos cinco valores de energia, com aproximação por Simpson.

Apesar de não podermos fazer uma comparação direta em relação aos resultados obtidos pelas duas diferentes formas de aproximação da integral em energia, uma vez que, devido à mudança de variável, exigida para a quadratura de Gauss, os valores apresentados são obtidos em diferentes pontos, podemos dizer que os resultados têm um comportamento qualitativo equivalente. À medida que tomamos mais pontos para a aproximação da integral, os resultados da quadratura de Gauss deverão convergir mais rapidamente. Devido aos baixos valores tomados, $M = 4$ ou $M = 5$, essa diferença não pode ainda ser sentida de forma significativa.

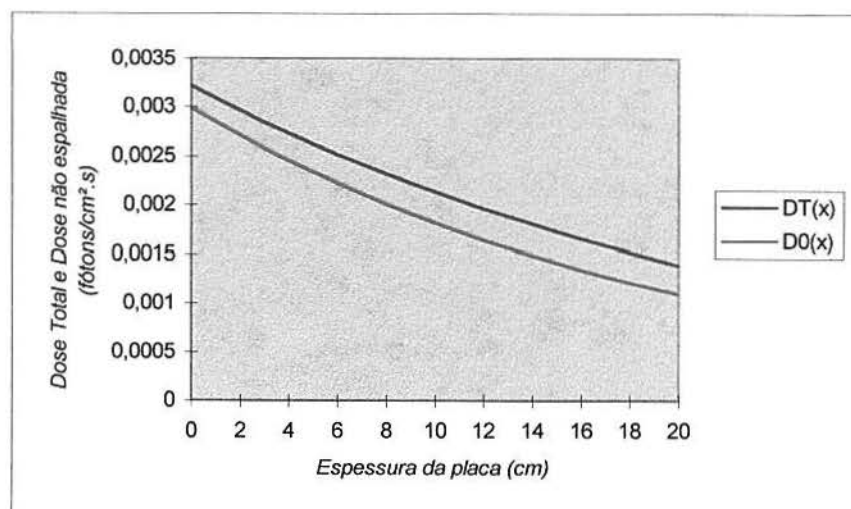


Figura 4.6. Taxa de Dose total absorvida e Dose devido ao fluxo não espalhado, para cinco valores de energia e aproximação por Simpson.

Finalmente, testamos a formulação para uma camada d'água de 100cm de espessura e uma energia do feixe incidente de fótons igual a 1,25MeV.

Resultados para domínios de maior espessura não foram apresentados por

Trindade [23]. A possibilidade de solução desse problema é devido à implementação da modificação nas exponenciais descrita em (2.2.22). Essa modificação se faz necessária, mesmo para $N = 2$, a partir da segunda energia.

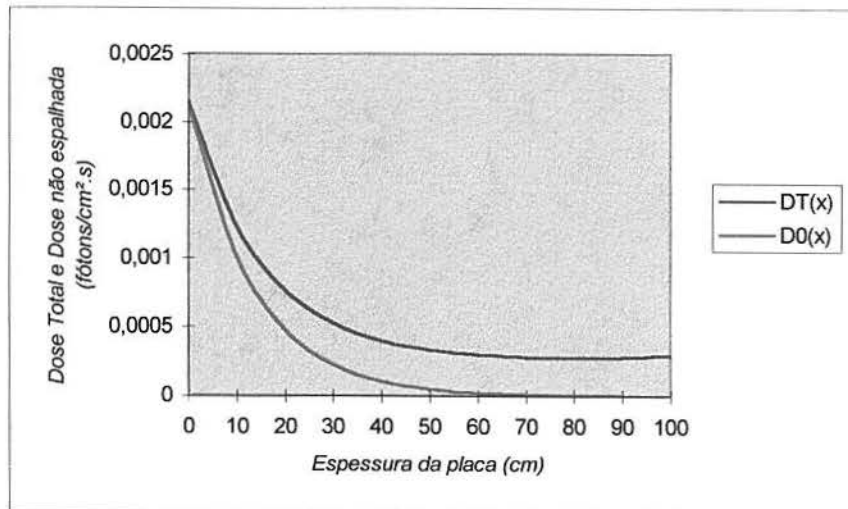


Figura 4.7. Taxa de Dose total absorvida e dose devido ao fluxo não espalhado, com cinco valores de energia e aproximação por Simpson, para uma placa de 100cm e energia do feixe incidente de fótons igual a $1,25\text{Mev}$.

Finalmente, cabe salientar que, apesar de termos testado a formulação proposta nos problemas anteriormente descritos, para efeitos de comparação com resultados disponíveis na literatura, podemos citar, ainda, uma outra importante aplicação possível: o cálculo do fator de “Buildup”. Esse fator é uma relação entre o fluxo total e o fluxo não espalhado, que permite o “ajuste” dos valores de fluxo, em problemas de grande espessura, ao comportamento exponencial esperado. Nesse caso, a formulação proposta nesse trabalho fornece uma expressão analítica na variável espacial para determinação desse fator, evitando ajustes experimentais.

5. CONCLUSÕES

◆ A análise da formulação proposta neste trabalho, mostra que o método LTS_N pode ser usado de forma muito eficiente para a solução da equação de transporte com núcleos que dependem da direção e do comprimento de onda, uma vez que todo o procedimento básico do método é mantido nesta proposta.

◆ O núcleo de Klein-Nishina para o espalhamento de fótons implica no desacoplamento dos sistemas para cada valor de energia e , portanto, M sistemas (valores de energia) de ordem N (método LTS_N) devem ser resolvidos.

◆ Como esperávamos, os resultados obtidos concordam com os obtidos pelo método LTP_N , bem como o comportamento exponencial da dose devido ao fluxo não espalhado, foi observado.

◆ Não podemos deixar de mencionar que, para os valores de energia usados nas aplicações numéricas aqui apresentadas, uma modelagem mais precisa deveria incluir, também, o processo de produção de pares e efeito fotoelétrico.

◆ Em relação ao tratamento da variável energia, apesar de sabermos que a quadratura de Gauss deverá apresentar resultados mais precisos, este fato só ficará melhor evidenciado quando for considerado um maior número de pontos para a aproximação da integral, ou seja, um maior número de energias.

◆ Em futuros trabalhos, resultados numéricos mais precisos poderão ser obtidos, para aproximações com maior ordem de quadratura e para um maior número de valores de energia, propiciando também, valores mais precisos para o cálculo do

“Buildup” .

◆ Esta proposta poderá ser usada na solução de problemas multidimensionais, podendo, assim, abordar problemas de cálculo de dose de forma mais realística.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ATKINSON, KENDALL E. **An Introduction to Numerical Analysis**. John Wiley & Sons, 1978.
- [2] BADRUZZAMAN, A., FAN, W. C. **Discrete ordinates methods for radiation transport**. In: A review of nuclear computational methods and their applications, p.332-335.
- [3] BARICHELLO, L. B. **Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenadas Discretas Unidimensional**. Porto Alegre: PROMEC, agosto, 1992. Tese de Doutorado - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [4] BARICHELLO, L. B., VILHENA, M. T. A General Analytical Approach to the one-group, one-dimensional transport equation. **Kerntechnik**. v.58, n.3, p.182-184, 1993.
- [5] BARICHELLO, L. B., **Comunicação Privada** . 1995.
- [6] BELL, G. & GLASSTONE, S. **Nuclear Reactor Theory**. Robert E. Krieger Publishing. Huntington, New York, 1970.
- [7] BRANCHER, J. D. **Formulação Analítica para a Solução do Problema de Ordenadas Discretas pelo Método LTS_N , para Valores de N grandes**. Porto Alegre: PPGEMM, 1996. Exame de qualificação ao Doutorado - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [8] CASE, K. M. & ZWEIFEL, P. F. **Linear Transport Theory**. Reading. Addison, Massachusetts - Wesley Publishing Company, 1967.

- [9] CHANDRASEKHAR, S. **Radiative Transfer**. Oxford University Press, London, 1960.
- [10] DUDERSDADT, J. J. & MARTIN, W. R. **Transport Theory**. John Willey & Sons, New York, 1979.
- [11] JOHNS, H. E. & CUNNINGHAM, J. R. **The Physics of Radiology**. Charles C. Thomas Publisher, Illinois, 1983.
- [12] KHAN, F. M. **The Physics of Radiation Therapy**. Williams & Wilkins. United States of America, 1992.
- [13] LEWIS & MULLER. **Computational Methods in Transport Theory**. JWS, 1984.
- [14] OLIVEIRA, J. V. P. de. **Formulação LTS_N para o Problema de Ordenadas Discretas com Anisotropia**. Porto Alegre: CPGMAP, 1993. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) - UFRGS.
- [15] PAZOS, R.P., VILHENA, M. T. **Convergence of the LTS_N Method: An Approach of C_0 - Semigroups**. Em impressão.
- [16] RABINOWITZ, P., DAVIS, P. J. **Methods of Numerical Integration**. Academic Press, 1975.
- [17] SARAIVA, L. E. **Estudo de criticalidade da placa plana por métodos analíticos de solução das aproximações P_N e S_N da equação do Transporte**. Porto Alegre: PROMEC, 1992. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [18] SCAFF, L. A. M. **Bases Físicas da Radiologia - Diagnóstico e Terapia**.

Sarvier S. A. Editora de livros médicos. São Paulo, 1979.

- [19] SEGATTO, C. F. **Formulação LTS_N para problemas de transporte sem simetria azimutal e problemas dependentes do tempo.** Porto Alegre: PROMEC, 1995. Exame de qualificação ao Doutorado - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [20] SEGATTO, C. F., VILHENA, M. T. **Solução genérica da Equação de Transporte Unidimensional para elevadas ordens de quadratura.** Aceito para publicação no XI ENFIR , 18 a 22/08/97. Poços de Caldas, MG.
- [21] SOUZA, S. I. S. **Determinação de Parâmetros Radiantes pelos métodos LTS_N e LTP_N para Geometria Planar.** Porto Alegre: PROMEC, 1993. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [22] STRANG, G. **Linear Algebra and its applications.** HBJ, 1980.
- [23] TRINDADE, L. B. **Cálculo da dose pelo método LTP_N aplicado à Equação de Boltzmann unidimensional para fótons em valores discretos de energia.** Porto Alegre: PROMEC, 1997. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Escola de Engenharia. UFRGS.
- [24] VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B. An Analytical Solution for the Multi-groups Slab Geometry Discrete Ordinates Problems. **Transport Theory and Statistical Physics.** 24(6), p.1029-1037, 1995.
- [25] VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B. A new analytical approach to solve

- the neutron transport equation. *Kerntechnik*. v.56, n.5, p. 334 - 336, 1991.
- [26] VILHENA, M. T., SEGATTO, C. F., BARICHELLO, L. B. **A particular solution for the S_N radiative transfer problems.** *JQSRT*. 53(4), p.467 - 469, 1995.
- [27] VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B., ZABADAL, J. R., SEGATTO, C. F., CARDONA, A. V. **On the solution of the One-Dimensional Transport Equation by the Laplace Transform.** Submetido à Publicação em *Progress in Nuclear Energy*.
- [28] WOOD, J. **Computational Methods in Reactor Shielding.** Pergamon Press. Oxford. England, 1982.
- [29] ZABADAL, J. R., VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B. **Solution of the Three - Dimensional One - groups Discrete Ordinates Problems by the LTS_N Method.** *Annals of Nuclear Energy*. 22(2), p. 131 - 134, 1995.
- [30] ZABADAL, J. R., VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B. **An Analytical Solution for the Two - Dimensional Discrete Ordinates Problem in a Convex Domain.** *Progress in Nuclear Energy*. 31(3), p. 225 - 228, 1997.
- [31] ZABADAL, J. R., VILHENA, M. T., BARICHELLO, L. B. **Solução da Equação de Ordenadas Discretas em Duas Dimensões pelo Método LTS_N .** IX ENFIR. Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo-

hidráulica. Caxambu, MG. p.90 - 92, 25 a 29/10/1993.

A. DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE- FORMA GENÉRICA

O principal objetivo da Teoria do Transporte é determinar a distribuição de partículas num meio, levando em conta o movimento das mesmas e sua interação com este meio. Entretanto, a natureza aleatória dos eventos de interação, nos impede de predizer o número exato de partículas, numa certa região, num dado tempo. Trabalhamos, então, com uma descrição matemática dos processos de transporte de partículas, que envolve uma aproximação estatística, baseada em algumas considerações:

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

De acordo com estas considerações, definimos uma quantidade que representa o número provável de partículas no tempo t em um elemento de volume dV , com energia dE sobre E e direções dadas por Ω , que será representada por:

$$N(r, \Omega, E, t)dVd\Omega dE. \quad (\text{A.1})$$

Consideremos, agora, o que acontece a este feixe de partículas, decorrido um intervalo de tempo Δt [6]. As partículas de energia E que sofrem uma colisão, podem ser consideradas como perdidas do feixe, ao passo que as que não colidem, permanecem; a distância percorrida por uma partícula no tempo Δt é $v\Delta t$; então, a probabilidade da mesma colidir neste tempo é $\sigma(r, E)v\Delta t$. A probabilidade de que uma partícula, que não sofre uma colisão no tempo Δt , permaneça no feixe é, conseqüentemente, $1 - \sigma(r, E)v\Delta t$.

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

$$= N(r, \Omega, E, t)[1 - \sigma(r, E)v\Delta t]dVd\Omega dE. \quad (\text{A.2})$$

Estas, voltarão à posição $r + \Omega v\Delta t$ no tempo $t + \Delta t$.

Além das partículas perdidas do feixe por colisões, algumas podem ingressar, como resultado de colisões com partículas estranhas ao feixe e de fontes independentes. Estas duas últimas quantidades, são dadas, respectivamente, como o número de partículas ingressantes no feixe como resultado de colisões:

$$= \left[\iiint \sigma(r, E')f(r; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)v'N(r, \Omega', E', t)d\Omega' dE' \right] dVd\Omega dE \Delta t.$$

(A.3)

e o número de partículas ingressantes no feixe através de fontes

$$= Q(r, \Omega, E, T) dV d\Omega dE \Delta t . \quad (\text{A.4})$$

Adicionando os três termos dados acima e eliminando $dV d\Omega dE$, a densidade angular de partículas na posição $r + \Omega v \Delta t$ no tempo $t + \Delta t$ é dada por

$$\begin{aligned} & N(r + \Omega v \Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) \\ = & N(r, \Omega, E, t)(1 - \sigma v \Delta t) + \left[\iint \sigma' f v' N(r, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \right] \Delta t + Q \Delta t \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde usamos $\sigma \equiv \sigma(r, E)$, $\sigma' f \equiv \sigma(r, E')$, $f(r; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$, frequentemente representado por $\sigma f(r; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ e $Q \equiv (r, \Omega, E, t)$. A seguir, dividindo ambos os membros desta expressão por Δt e fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, o resultado, após simplificações, é

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(r + \Omega v \Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) - N(r, \Omega, E, t)}{\Delta t} \right] + \sigma v N(r, \Omega, E, t) \\ = & \iint \sigma' f v' N(r, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + Q . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O primeiro termo da equação (A.6) é denotado por $\frac{dN}{dt}$, onde N representa $N(r, \Omega, E, t)$.

Se o termo $N(r, \Omega, E, t + \Delta t)$ é acrescentado e subtraído do numerador entre colchetes, na equação (A.6), são obtidas duas expressões que podem ser facilmente calculadas, quais sejam

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(r, \Omega, E, t + \Delta t) - N(r, \Omega, E, t)}{\Delta t} \right] = \frac{\partial N}{\partial t} \quad (\text{A.7})$$

e

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(r + \Omega v \Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) - N(r, \Omega, E, t + \Delta t)}{\Delta t} \right] = v \Omega \cdot \nabla N(r, \Omega, E, t) . \quad (\text{A.8})$$

O último resultado pode ser facilmente calculado em coordenadas cartesianas, onde r tem coordenadas x, y, z e Ω tem coordenadas $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$. O segundo membro da equação (A.8) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(x + \Omega_x v \Delta t, y + \Omega_y v \Delta t, z + \Omega_z v \Delta t, \dots) - N(x, y, z, \dots)}{\Delta t} \right] \\ &= v \Omega_x \frac{\partial N}{\partial x} + v \Omega_y \frac{\partial N}{\partial y} + v \Omega_z \frac{\partial N}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

onde N é $N(x, y, z, \dots)$. Esta expressão é v vezes a derivada direcional de N na direção Ω e pode, conseqüentemente, ser representada por $v \Omega \cdot \nabla N$ como na equação (A.8).

Após substituir (A.6), (A.7) e (A.8) em (A.5) , o resultado é

$$\frac{\partial N}{\partial t} + v\Omega \cdot \nabla N + \sigma v N = \iint \sigma' f v' N' d\Omega' dE' + Q \quad (\text{A.10})$$

onde usamos $N \equiv N(r, \Omega, E, t)$, $N' \equiv N(r, \Omega', E, t)$ e $\sigma, \sigma' f$ e Q , são definidos como acima.

A equação (A.10) é a forma básica da equação do transporte. Quanto ao significado físico dos dois primeiros termos da mesma, podemos dizer que juntos são iguais ao primeiro termo da equação (A.6). A quantidade $\frac{\partial N}{\partial t}$ é a variação do tempo de mudança da densidade angular de partículas, na posição fixa r ; esta, difere de $\frac{dN}{dt}$, a razão de mudança no feixe em movimento, com velocidade de partículas $V = v\Omega$.

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

Na verdade, este termo representa o efeito do fluxo, que poderia ser obtido por derivação da variação daquele fluxo de nêutrons, através de um infinitesimal elemento de volume. Se este elemento for limitado por planos, tendo coordenadas

$x, x + \Delta x; y, y + \Delta y$ e $z, z + \Delta z$, tais que o volume seja $dV = \Delta x \Delta y \Delta z$, o número de partículas no elemento de volume, que estão se movendo na direção Ω é, então, $N(x, y, z, \Omega, E, t)dV$. A variação sob a qual as partículas entram no elemento de volume, como resultado do movimento através de duas faces perpendiculares, na direção x , isto é, as faces com coordenadas x e $x + \Delta x$, é, então:

Número de partículas entrando no elemento de volume por unidade de tempo

$$= v_x N(x, y, z) \Delta y \Delta z \quad (\text{através da face em } x).$$

e o número de partículas deixando o elemento de volume por unidade de tempo

$$= v_x N(x + \Delta x, y, z) \Delta y \Delta z \quad (\text{através da face em } x + \Delta x).$$

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

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

e, então, o número de partículas que ingressam no infinitesimal elemento de volume, devido ao fluxo, é $-v \cdot \nabla N$, por unidade de volume. Esta quantidade é igual a $-v\Omega \cdot \nabla N$ e, conseqüentemente

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{dN}{dt} - v\Omega \cdot \nabla N . \quad (\text{A.11})$$

A Equação do Transporte dada em (A.10) pode, também, ser expressa em termos do fluxo angular Φ , que é igual a vN ; então, considerando

$$\Phi \equiv vN \equiv \Phi(r, \Omega, E, t) \quad (\text{A.12})$$

e

$$\Phi' \equiv v'N' \equiv \Phi(r, \Omega', E', t) , \quad (\text{A.13})$$

o resultado é

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \Omega \nabla \Phi + \sigma \Phi = \iint \sigma' f \Phi' d\Omega' dE' + Q . \quad (\text{A.14})$$

B. A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO ESCRITA EM TERMOS DE COMPRIMENTO DE ONDA

Quando consideramos o comportamento de fótons ao invés de nêutrons, é mais conveniente referir a energia liberada pela radiação e não pelo número de partículas [22] e trabalhar com uma quantidade $I(\underline{r}, E, \underline{\Omega})$, chamada intensidade de fluxo angular de energia, relacionada com a densidade de fluxo angular de energia, pela expressão

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

Também, ao invés da variável energia E , é mais natural trabalhar com o comprimento de onda fóton, λ , em unidades Compton. Isto é, usamos $\lambda = 0,511/E$, onde E é dada em unidades Mev. Para o caso particular de um sistema independente do tempo com fonte plana infinita na origem

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

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

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

1) Como as partículas precisam ser conservadas, podemos escrever

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

E, como

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

podemos escrever

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

isto é

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

ou seja

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

Agora, definindo

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

segue que

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

2) Uma vez que

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

então

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

e, portanto,

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

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

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

Agora, usando a equação (B.10), podemos escrever a equação (B.13) como

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

onde usamos

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

e

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

A equação (B.14) é a formulação da equação de Boltzmann encontrada para melhor resolver problemas de fótons gamma. O efeito do fator $\frac{\lambda}{\lambda'}$ na equação (B.16) é “suavizar ” a variação do espalhamento do núcleo - assim tornando o “espalhamento integral ” mais simples para a aproximação numérica na equação (B.14) [28] .

C. INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

C1. Regra de Simpson

A regra de Simpson consiste, basicamente, em aproximar a área sob uma curva num intervalo $[a, b]$ pela soma das áreas de faixas, determinadas pela divisão de $[a, b]$ em um número par de subintervalos igualmente espaçados, por uma interpolação polinomial quadrática. A fórmula geral [1] para tal aproximação é

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]\Delta x \quad (\text{C1.1})$$

onde $n \in \mathbf{Z}$ é o número (par) de subintervalos,

$$\Delta x = \frac{b-a}{n}, \quad (\text{C1.1a})$$

e

$$x_k = a + k\Delta x, \quad k \in \mathbf{Z}. \quad (\text{C1.1b})$$

A fórmula (C1.1) é exata quando $f(x)$ é um polinômio de grau menor ou igual a 3. O erro E_n para f contínua, com derivada contínua até quarta ordem, em $[a, b]$,

para n par, satisfaz

$$|E_n| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} \xi \quad (\text{C1.2})$$

onde ξ é o valor máximo de $|f^{(4)}(x)|$ em $[a, b]$.

C2. Quadratura de Gauss

A fórmula de integração de Gauss-Legendre [1] é

$$\int_{-1}^1 F(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i F(x_i) \quad (\text{C2.1})$$

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

$$w_i = \frac{-2}{(n+1)P'_n(x_i)P_{n+1}(x_i)}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{C2.2})$$

A fórmula (C2.1) é exata quando $F(x)$ é um polinômio de grau menor ou igual a $2n - 1$ e fornece um erro

$$E_n(F) = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^2} \cdot \frac{F^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} , \quad (\text{C2.3})$$

para algum $-1 < \zeta < 1$, se $f(x)$ é $2n$ vezes continuamente diferenciável em $[-1, 1]$.

Para integrais definidas em outro intervalo, usamos ainda a mudança linear de variável

$$\int_a^b F(t)dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 F\left(\frac{a+b+x(b-a)}{2}\right) dx , \quad (\text{C2.4})$$

que reduz a integral ao intervalo padrão $[-1, 1]$.

Tabela D2. Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Quadratura de Gauss, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 2Mev .

$E_j[\text{Mev}]$	$\sigma_j(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_{a_j}(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^2/\text{g}]$
1.4628	0.0583	0.0284
0.7132	0.0827	0.0325
0.4072	0.1052	0.0328
0.2849	0.1213	0.0316
0.2364	0.1289	0.0305

Tabela D3. Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 2Mev .

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

Tabela D4. Coeficientes de atenuação e absorção em função da energia, considerando Regra de Simpson, cinco valores de energia e energia do feixe de fótons incidente igual a 1.25Mev .

$E_j[\text{Mev}]$	$\sigma_j(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_{a_j}(\text{H}_2\text{O})[\text{cm}^2/\text{g}]$
1.25	0.0633	0.0295
0.5623	0.0920	0.0330
0.3627	0.1106	0.0326
0.2677	0.1238	0.0312
0.2121	0.1334	0.0300

Tabela D5. Dados obtidos para água para o cálculo da constante α .

Meio	$\rho[\text{g}/\text{cm}^3]$	A	Z	$\alpha[\text{cm}^{-1}]$
Água	1.00	18	7.42	0.1651