

Solução em forma fechada para a equação íntegro diferencial de transporte de fótons

Janice Teresinha Reichert,

Departamento de Matemática, Universidade Tecnológica Federal do Paraná
 85504-300, Pato Branco, PR,
 E-mail: janice@utfpr.edu.br,

Liliane Basso Barichello

Instituto de Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul
 91509-900, Porto Alegre, RS,
 E-mail: lbaric@mat.ufrgs.br

Resumo: Neste trabalho, uma solução em forma fechada é proposta para a equação íntegro diferencial de transporte de fótons unidimensional. A dependência energética no problema é abordada de forma discretizada. O problema resultante, com dependência angular e espacial, é resolvido pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO), resultando em uma solução analítica em termos da variável espacial. Simulações numéricas avaliam o chamado fator de buildup, usado como fator de correção em procedimentos práticos associados ao cálculo de doses em tratamentos de radioterapia.

Palavras-chave: Equação de transporte, núcleo de Klein-Nishina; radioterapia; método analítico de ordenadas discretas.

1 Introdução

Uma das quantidades de interesse em tratamentos por radioterapia é a energia depositada, ou dose de radiação. Para compreender como ocorre a interação da radiação com a matéria, e analisar a energia depositada, faz-se necessário um bom entendimento da distribuição do fluxo (intensidade) de radiação num determinado meio [5], que pode ser obtido através da solução da equação íntegro diferencial de transporte de partículas, particularmente de fótons [6]. Para o caso de baixas energias, a característica do chamado espalhamento Compton, predominante no processo [6, 9], introduz uma dificuldade maior no tratamento do termo integral da equação. Resultados clássicos são conhecidos [9] para problemas unidimensionais em meio infinito, utilizando método conhecido como o método dos momentos, que se resume na solução de uma equação integral de Volterra por aproximação numérica. A solução do problema em meio finito, onde esta abordagem citada anteriormente não se aplica, é sempre um desafio e, em geometrias complexas é em geral tratado por abordagens probabilísticas [4]. Uma dificuldade adicional do problema, além da conhecida complexidade dos modelos que envolvem a equação de Boltzmann linear, se encontra na dependência dos limites de integração da equação à variável comprimento de onda.

Neste trabalho, na seção 2, introduzimos a equação de transporte para fótons com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, que define o problema básico a ser considerado. A seguir, na seção 3, propomos um tratamento discretizado para a variável energia e apresentamos o método ADO [1] para tratamento da dependência angular da equação, resultando em uma solução em forma fechada para o problema, analítica em termos da variável espacial. Finalmente, nas seções 4 e 5, apresentamos resultados numéricos e considerações finais.

2 Equação de Transporte para Fótons

Consideremos a equação de transporte para fótons escrita na forma [6],

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

onde $I(x, \lambda, \mu)$ é a intensidade de radiação, $x \in (0, x_0)$ representa a variável espacial, $\mu \in [-1, 1]$ é o cosseno do ângulo polar, $\lambda \in [\lambda_0, \infty)$ é o comprimento de onda e λ_0 o comprimento de onda associado à energia do feixe incidente de radiação, no domínio. Além disto, $\sigma(\lambda)$ representa o coeficiente de atenuação linear. Considera-se, o núcleo de Klein-Nishina para espalhamento Compton [2, 6, 7, 9], $K(\lambda', \lambda)$, presente na equação (1), definido como sendo nulo, exceto se $\lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2$, sendo, neste caso, dado por

$$K(\lambda', \lambda) = \frac{3}{8} \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right) \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right]. \quad (2)$$

Ainda,

$$\alpha = \frac{N_A Z \sigma_T \rho}{A} = 0.40061 \frac{Z \rho}{A} [\text{cm}^{-1}], \quad (3)$$

onde A é a massa atômica, Z é o número atômico, N_A é o número de Avogadro, σ_T é a seção de choque de Thomson, e ρ é a densidade do meio.

Devido à característica do espalhamento Compton, e conforme definição do núcleo de Klein-Nishina, o termo integral na equação (1), de fato, tem limite inferior igual a λ_0 ou $\lambda - 2$, o que for maior, conforme já foi observado por [2]. Neste trabalho, propõe-se uma solução de caráter analítico, para a aproximação em ordenadas discretas da equação (1), considerando que a intensidade de radiação $I(x, \lambda, \mu)$, seja conhecida nas fronteiras do domínio: placa plana de espessura x_0 .

3 Desenvolvimento

Considerando que o termo integral na equação (1) tem limites dependentes da variável comprimento de onda λ , o que dificulta a proposição de um esquema de quadratura, propomos neste trabalho, um esquema que assegure que o valor $\max\{\lambda_0, \lambda - 2\}$ seja um dos nós da quadratura, caso contrário o problema discretizado levaria a um sistema com número maior de incógnitas do que de equações. Assim, primeiramente, fixa-se um valor máximo, denotado por λ_F , como aproximação numérica do limite superior (infinito) do intervalo de definição da variável de interesse, $\lambda \in [\lambda_0, \infty)$. Posteriormente, o espaçamento uniforme entre os pontos, $h = (\lambda_F - \lambda_0)/n$ é definido baseado na escolha de um número de intervalos n apropriado para que a propriedade acima mencionada se cumpra. Ainda, $\lambda_0 = 0.511/E_0$ é um valor conhecido. Assim, $M = n + 1$ será o número de intervalos (grupos) de energia.

Fazendo $\lambda_1 = \lambda_0$ o primeiro valor discretizado, os demais valores para a discretização da variável energia são calculados como, $\lambda_i = \lambda_{i-1} + h$, $i = 2, 3, \dots, M$, garantindo que $\max\{\lambda_1, \lambda_i - 2\}$, $i = 1, 2, \dots, M$ esteja sempre entre os valores discretizados de λ . Para cada λ_i , $i = 1, \dots, M$, resolve-se então a equação de transporte,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) = \alpha \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \times \int_{\max\{\lambda_1, \lambda_i-2\}}^{\lambda_i} K(\lambda', \lambda_i) P_l(1 + \lambda' - \lambda_i) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'. \quad (4)$$

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

$$\max\{\lambda_1, \lambda_i - 2\} = \lambda_r \in \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M\}, \tag{5}$$

tem-se,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) &= \alpha \overleftarrow{\prod}_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \\ &\times \int_{\lambda_r-1}^{\lambda_i-1} K(\lambda', \lambda_i) P_l(1+\lambda' - \lambda_i) P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda', \end{aligned} \tag{6}$$

e usando a regra dos trapézios,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda_i, \mu) + \sigma(\lambda_i) I(x, \lambda_i, \mu) &= \alpha \overleftarrow{\prod}_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) \left(\frac{\lambda_i - \lambda_r}{2} \right) [K(\lambda_r, \lambda_i) P_l(1 + \lambda_r - \lambda_i) \times \\ &\int_{-1}^{-1} P_l(\mu') I(x, \lambda_r, \mu') d\mu' + K(\lambda_i, \lambda_i) P_l(1 + \lambda_i - \lambda_i) \int_{-1}^{-1} P_l(\mu') I(x, \lambda_i, \mu') d\mu'], \end{aligned} \tag{7}$$

onde λ_r é um valor fixo (para cada i).

Chamando

$$K(\lambda_r, \lambda_i) \equiv K_{ri}, \tag{8}$$

$$I(x, \lambda_i, \mu) = I_i(x, \mu), \tag{9}$$

e denotando por C_l , a matriz de ordem $M \times M$ com coeficientes não nulos definidos por,

$$(C_l)_{i,r} = \frac{(\lambda_i - \lambda_r)}{2} K_{ri} P_l(1 + \lambda_r - \lambda_i), \tag{10}$$

pode-se escrever a equação (7), utilizando a notação matricial,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{l}(x, \mu) + \Sigma \mathbf{l}(x, \mu) = \alpha \overleftarrow{\prod}_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \mathbf{C}_l \int_{-1}^{-1} P_l(\mu') \mathbf{l}(x, \mu') d\mu', \tag{11}$$

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

$$\mathbf{l}(x, \mu) = (I_1(x, \mu), I_2(x, \mu), \dots, I_M(x, \mu))^T, \tag{12}$$

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

No problema resultante o tratamento da variável angular é feito pelo método analítico de ordenadas discretas (ADO) [1].

3.1 Tratamento da variável angular pelo método de ordenadas discretas

A equação (11) em pode ser escrita em termos de ordenadas discretas,

$$\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{l}(x, \mu_i) + \Sigma \mathbf{l}(x, \mu_i) = \frac{\alpha}{2} \overleftarrow{\prod}_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \overleftarrow{\prod}_{s=1}^N w_s \mathbf{l}_{l,s}(x), \tag{13}$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \mathbf{l}(x, -\mu_i) + \Sigma \mathbf{l}(x, -\mu_i) = \frac{\alpha}{2} \overleftarrow{\prod}_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \overleftarrow{\prod}_{s=1}^N w_s \mathbf{l}_{l,s}(x), \tag{14}$$

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

$$I_{l,s}(x) = P_l(\mu_s)[I(x, \mu_s) + (-1)^l I(x, -\mu_s)], \tag{15}$$

Aqui denotamos por $\{\mu_s\}$ os pontos de quadratura e $\{w_s\}$ os pesos da quadratura definidos no intervalo $[0, 1]$. Buscando soluções da forma exponencial para as equações (13) e (14), escrevemos

$$I(x, \pm\mu_i) = \Phi(\nu, \pm\mu_i)e^{-x/\nu}, \tag{16}$$

substituindo esta expressão nas Eqs. (13) and (14) e após algumas manipulações algébricas [8], podemos escrever, para $i = 1, \dots, M$, o sistema

$$(\Sigma - \frac{\mu_i}{\nu}\hat{I})\Phi(\nu, \mu_i) = \frac{\alpha}{2} \prod_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \prod_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \tag{17}$$

$$(\Sigma + \frac{\mu_i}{\nu}\hat{I})\Phi(\nu, -\mu_i) = \frac{\alpha}{2} \prod_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) P_l(\mu_i) \mathbf{C}_l \prod_{s=1}^N w_s \Phi_{l,s}(\nu), \tag{18}$$

onde

$$\Phi_{l,s} = P_l(\mu_s)[\Phi(\nu, \mu_s) + (-1)^l \Phi(\nu, -\mu_s)], \tag{19}$$

e \hat{I} é a matriz identidade $M \times M$.

Introduzindo os vetores de ordem MN ,

$$\Phi_+(\nu) = [\Phi^T(\nu, \mu_1), \Phi^T(\nu, \mu_2), \dots, \Phi^T(\nu, \mu_N)]^T, \tag{20}$$

e

$$\Phi_-(\nu) = [\Phi^T(\nu, -\mu_1), \Phi^T(\nu, -\mu_2), \dots, \Phi^T(\nu, -\mu_N)]^T, \tag{21}$$

onde T denota a operação transposta, as matrizes quadradas ($MN \times MN$),

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\dots, w_i \hat{I}, \dots\}, \tag{22}$$

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\dots, \mu_i \hat{I}, \dots\}, \tag{23}$$

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\dots, \Sigma, \dots\}, \tag{24}$$

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

$$\Pi_l = [P_l(\mu_1)\hat{I}, P_l(\mu_2)\hat{I}, \dots, P_l(\mu_N)\hat{I}]^T, \tag{25}$$

as Eqs. (17) e (18) podem ser escritas como,

$$(\mathbf{D} - \frac{1}{\nu}\mathbf{M})\Phi_+(\nu) = \frac{\alpha}{2} \prod_{l=0}^L (2l+1) \Pi_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \tag{26}$$

e

$$(\mathbf{D} + \frac{1}{\nu}\mathbf{M})\Phi_+(\nu) = \frac{\alpha}{2} \prod_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) \Pi_l \mathbf{C}_l \mathbf{G}_l(\nu), \tag{27}$$

com

$$\mathbf{G}_l(\nu) = \Pi_l^T \mathbf{W} [\Phi_+(\nu) + (-1)^l \Phi_-(\nu)]. \tag{28}$$

Agora, chamando

$$\mathbf{U} = \Phi_+(\nu) + \Phi_-(\nu), \tag{29}$$

$$\mathbf{V} = \Phi_+(\nu) - \Phi_-(\nu) \tag{30}$$

fazendo a soma e a diferença das Eqs. (26) e (27) obtemos

$$EX = \frac{1}{\nu}Y \quad e \quad HY = \frac{1}{\nu}X, \quad (31)$$

onde

$$E = (D - \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \Pi_l C_l [1 + (-1)^l \Pi_l^T W]) M^{-1}, \quad (32)$$

$$H = (D - \frac{\alpha}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) \Pi_l C_l [1 - (-1)^l \Pi_l^T W]) M^{-1}, \quad (33)$$

$$X = MU, \quad Y = MV. \quad (34)$$

Utilizando as equações (31) obtêm-se dois problemas de autovalores,

$$(HE)X = \lambda X \quad (35)$$

$$(EH)Y = \lambda Y \quad (36)$$

onde $\lambda = 1/\nu^2$.

Os autovalores λ_j e autovetores correspondentes $X(\lambda_j)$, $j = 1, 2, \dots, MN$ são utilizados para escrever

$$\Phi_+(\nu_j) = \frac{1}{2} M^{-1} (\hat{I} + \nu_j E) X(\lambda_j) \quad (37)$$

$$\Phi_-(\nu_j) = \frac{1}{2} M^{-1} (\hat{I} - \nu_j E) X(\lambda_j), \quad (38)$$

para $j = 1, 2, \dots, (M+1)N$. A expressão \hat{I} é a matriz identidade de ordem $MN \times MN$.

Agora definindo

$$I_+(x) = [I^T(x, \mu_1), I^T(x, \mu_2), \dots, I^T(x, \mu_N)]^T, \quad (39)$$

$$I_-(x) = [I^T(x, -\mu_1), I^T(x, -\mu_2), \dots, I^T(x, -\mu_N)]^T, \quad (40)$$

podemos escrever, em forma fechada, a solução em ordenadas discretas, para o problema homogêneo dado pelas Eqs. (13) e (14) como

$$I_+(x) = \sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_+(\nu_j) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_-(\nu_j) e^{-(x_0-x)/\nu_j}], \quad (41)$$

e

$$I_-(x) = \sum_{j=1}^{MN} [A_j \Phi_-(\nu_j) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_+(\nu_j) e^{-(x_0-x)/\nu_j}] \quad (42)$$

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

4 Resultados numéricos e aspectos computacionais

O cálculo da dose de radiação, uma das quantidades de interesse que podem ser avaliadas a partir da solução desenvolvida nas seções anteriores, pode ser feita, segundo [2, 7], como

$$D_T(\mu_0 x) = m_e c^2 \int_{\lambda_0}^{\infty} \mu_a(\lambda) \hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda) \frac{1}{\lambda^2} d\lambda, \quad (43)$$

onde o fluxo $\hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda)$ é definido por,

$$\hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda) = \int_0^x I(\mu_0 x, \lambda, \mu) d\mu, \quad (44)$$

$m_e c^2 = 0.511/E_0$, sendo E_0 igual a energia incidente, μ_0 o coeficiente de atenuação do meio, para a energia incidente E_0 e $\mu_a(\lambda)$ o coeficiente de absorção, utilizado aqui como sendo o do ar. Para avaliação numérica da equação (43), o mesmo esquema de discretização e quadratura descrito na seção (3) é utilizado.

O fator de buildup, que é normalmente usado como um parâmetro de correção (para evitar a solução da equação que envolve o termo integral de espalhamento) entre o fluxo que inclui o espalhamento e o fluxo devido aos fótons não espalhados [3], é calculado como

$$B(\mu_0 x) = \frac{D_T(\mu_0 x)}{D_0(\mu_0 x)}, \quad (45)$$

onde a expressão no denominador é a dose devido à radiação primária, ou seja, ao fluxo de radiação não colidido $\hat{\Phi}(\mu_0 x, \lambda_0)$.

Para o problema teste aqui abordado definimos, como condições de contorno,

$$I(0, \lambda_0, \mu) = 1, \quad \text{para } \mu > 0, \quad (46)$$

$$I(0, \lambda_i, \mu) = 0, \quad \text{para } \mu > 0, \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (47)$$

$$I(x_0, \lambda_i, \mu) = 0 \quad \text{para } \mu < 0, \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (48)$$

e consideramos uma placa plana homogênea de água (espessura definida em termos de $\mu_0 x$), com energia incidente de 1Mev , sendo, neste caso, $\mu_0 = 0.0706$ o valor do coeficiente de atenuação. Usamos nove grupos de energia para a discretização da variável comprimento de onda e $N = 20$ para o método ADO. Determinamos o fator de buildup, e comparamos com resultados obtidos com outra abordagem, que considera a dependência espectral como contínua, apresentada em [8].

Tabela 1: Comparação do fator de buildup.

$\mu_0 x$	Este trabalho	Ref [8]
1	2.5281	2.1111
2	2.8933	2.8704
3	3.2588	3.5124
4	3.6569	4.0692
5	4.1116	4.5481
6	4.6399	4.9513

Observamos uma concordância minimamente satisfatória entre as duas abordagens utilizadas. Algumas diferenças, do caso aqui apresentado e na abordagem contínua, podem ser atribuídas a resolução totalmente analítica utilizada no caso contínuo (baseada em uma expansão espectral na variável comprimento de onda) comparada com a abordagem aqui utilizada através da regra dos trapézios para a resolução das integrais. No entanto, a proposta aqui descrita pode ser considerada mais simples e possivelmente mais facilmente inserida no tratamento de problemas mais complexos. De acordo com o nosso conhecimento não existem na literatura outros resultados numéricos para este problema aplicado a placas planas.

Na tabela seguinte apresentamos uma descrição de valores para diferentes ordens de aproximação, para esta abordagem, considerando o meio como água, com energia incidente de 1Mev e nove grupos de energia, em função do número de pontos de quadratura considerados para o método ADO,

Tabela 2: Convergência numérica do método ADO.

N	$\mu_0 x = 1$
6	2.5291
10	2.5283
14	2.5282
20	2.5281
24	2.5281
28	2.5281

Como observa-se na tabela 2, com $N = 20$ obtém-se a concordância de quatro dígitos significativos, o que indica uma rápida convergência numérica do método.

Os resultados numéricos são obtidos com baixo esforço computacional e gerados utilizando a linguagem FORTRAN e executadas em um notebook Centrino 2 Duo 2GHz, em menos de 5 segundos. O bom desempenho computacional, deve-se principalmente 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 utilizados em problemas de transporte.

5 Comentários Finais

Apresentou-se uma solução em forma fechada, analítica em termos da variável espacial, para a equação de transporte de fótons com espalhamento Compton. Foi usada uma abordagem discreta da dependência espectral, para obtenção de resultados numéricos, para o problema da placa plana submetida a condições de contorno de radiação incidente conhecidas nas extremidades. A abordagem de quadratura proposta permitiu um tratamento satisfatório ao problema de dependência dos limites de integração em relação à variável comprimento de onda.

Referências

- [1] L.B. Barichello, C. E. Siewert, A Discrete-Ordinates Solution for a Non-Grey Model With Complete Frequency Redistribution, *Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 62 (1999), 665-675.
- [2] U. Fano, L. V. Spencer, M.J. Berger, "Encyclopedia of Physics" - Volume XXXVIII/2, Neutrons and Related Gamma Ray Problems, Springer-Verlag, Berlin, 1959.
- [3] H. Goldstein, "Fundamental Aspects of Reactor Shielding", Addison-Wesley Publishing Company, INC., 1959.
- [4] H. Hirayama, K. Shin, Application of the EGS4 Monte Carlo Code to a Study of Multilayer Gamma-Ray Exposure Buildup Factor of up to 40 mfp, *Journal of Nuclear Science and Technology*, 35 (1998), 816-829.
- [5] H.E. Johns, J.R. Cunningham, "The Physics of Radiology", Thomas Springfield Press, 1983.
- [6] J. K. Shultis, R. E. Faw, "Radiation Shielding", American Nuclear Society, Inc., 2000, La Grange Park, Illinois, USA.
- [7] J. J. Duderstadt, W. R. Martin, "Transport Theory", John Wiley & Sons, Inc., 1979.
- [8] J.T. Reichert, "Abordagens Analíticas para Problemas de Transporte de Radiação com Dependência Espectral", Tese de Doutorado, PROMEC-UFRGS, 2009.
- [9] J. Wood, "Computational Methods in Reactor Shielding", Oxford, Pergamon Press, 1982.