

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

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE FÓTONS PARA UMA
PLACA PLANA HETEROGÊNEA, MODELO DE MULTIGRUPO COM
NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE KLEIN-NISHINA**

por

Roberto Lunelli

Dissertação submetida como requisito parcial para obter o grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Porto Alegre, janeiro de 2002

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Lunelli, Roberto

Solução da equação de transporte de fótons para uma placa plana heterogênea, modelo de multigrupo com núcleo de espalhamento de klein-nishina / Roberto Lunelli. - Porto Alegre: CPGMAp da UFRGS, 2002.

82 p.: il.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio Grande do sul. Curso de Pós Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2002. Borges, Volnei, Orient.

I. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor: Profa. Wrana Panizzi

Pró- Reitor de Pesquisa e Pós- Graduação: Prof. José Carlos Ferraz Hennemann

Diretor do Instituto de Matemática: Prof. Aron Teitelbaum

Coordenador do CPGMAp: Prof. Rudnei Cunha

Bibliotecário- Chefe do Instituto de Matemática: Carlos Brandão Schwab

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE FÓTONS PARA UMA
PLACA PLANA HETEROGÊNEA, MODELO DE MULTIGRUPO COM
NÚCLEO DE ESPALHAMENTO DE KLEIN-NISHINA**

por

Roberto Lunelli

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Curso 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

Orientador: Prof. Dr. Volnei Borges

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr.

Prof. Dr.

Prof. Dr.

Prof. Dr.

Coordenador do Curso de Pós-
Graduação em Matemática Aplicada.

Porto Alegre, janeiro de 2002

RESUMO

Neste trabalho o método LTS_N é utilizado para resolver a equação de transporte de fótons para uma placa plana heterogênea, modelo de multigrupo, com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, obtendo-se o fluxo de fótons em valores discretos de energia. O fluxo de fótons, juntamente com os parâmetros da placa foram usados para o cálculo da taxa de dose absorvida e do fator de buildup. O método LTS_N consiste na aplicação da transformada de Laplace num conjunto de equações de ordenadas discretas, fornece uma solução analítica do sistema de equações lineares algébricas e a construção dos fluxos angulares pela técnica de expansão de Heaviside. Essa formulação foi aplicada ao cálculo de dose absorvida e ao fator de Buildup, considerando cinco valores de energia. Resultados numéricos são apresentados.

ABSTRACT

In this work the LTS_N method is used to solve the transport equation for photons in a heterogeneous slab, using the multigroup model in the energy with Klein-Nishina scattering kernel, obtaining the angular flux for discrete values of energy. The flux parameters of the slab are used for calculating the absorbed dose and buildup factor. The LTS_N method consists of the application of the Laplace transform to the set of discrete ordinates equations, analytical solution of the algebraic linear system resulting by the recursive method and restoration of the angular fluxes using the Heaviside expansion technique. This formulation is applied to the calculation of the absorbed dose and buildup factor for five energy values. Numerical results are presented.

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Espessura da placa
A	Massa atômica
$A_N(s)$	Matriz do sistema gerado pela formulação LTS_N
$A_N^{-1}(s)$	Inversa da matriz $A_N(s)$
N	Número de pontos da quadratura de Gauss
N_A	Número de Avogadro
T	Matriz triangular superior
U	Matriz unitária
U^T	Matriz Transposta da matriz U
ω_m	Pesos da quadratura de Gauss
μ_m	Raízes do polinômio de Legendre
σ_T	Seção de choque total
σ_e	Seção de choque de espalhamento elástico
σ_i	Seção de choque de espalhamento inelástico
σ_f	Seção de choque de fissão
$\psi_i(x)$	Fluxo angular de partículas
E	Energia da radiação(nêutrons)
f_m	Fluxo angular de partículas incidentes na fronteira $x=0$ da placa
g_m	Fluxo angular de partícula incidentes na fronteira $x=X$ da placa
$J(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$	Corrente de partículas da posição \underline{r} e direção $\underline{\Omega}$, com energia E e no tempo t .

$j(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$ Corrente angular de partículas na posição $\underline{\Omega}$, com energia E e no tempo t

$N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$ Densidade angular de partículas na posição \underline{r} e direção $\underline{\Omega}$, com energia E e no tempo t

$n(\underline{r}, E, t)$ Densidade de partículas na posição \underline{r} , com energia E e no tempo t

$Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$ Fonte de partículas na posição \underline{r} , e direção $\underline{\Omega}$, com energia E e no tempo t

$Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E)$ Fonte de partículas, independente do tempo

\underline{r} Vetor posição

\underline{v} Vetor Velocidade

x Variável espacial na geometria da placa

X Espessura da placa plana

μ Direção da partícula espalhada

μ Direção da partícula incidente

μ_k Direções discretas, raízes do polinômio de Legendre de grau N

$\bar{\nu}(\underline{r}, E')$ Número Médio de partículas produzidas por uma fissão em \underline{r} causada por uma partícula de energia E'

ρ Densidade

$\sigma_e(\underline{r}, E)$ Seção de choque de espalhamento inelástico de partículas na posição \underline{r} e energia E

$\sigma_f(\underline{r}, E)$ Seção de choque de fissão de partículas na posição \underline{r} e energia E

$\sigma_i(\underline{r}, E)$ Seção de choque de espalhamento inelástico de partículas na posição \underline{r} e energia E

$\sigma_s(\mu' \rightarrow \mu)$	Seção de choque de espalhamento
$\sigma_s(\underline{\Omega}E' \rightarrow \underline{\Omega}, E')$	Seção de choque de espalhamento de partículas com direção $\underline{\Omega}$ e energia E' para a direção $\underline{\Omega}$ com energia E
σ_{s0}	Seção de choque diferencial de espalhamento de ordem zero
σ_{s1}	Seção de choque diferencial de espalhamento de primeira ordem
σ_k	Seção de choque total
$\sigma_t(\underline{r}, E)$	Seção de choque total de partícula na posição \underline{r} com energia E
$\sigma_r(\underline{v}, E)$	Seção de choque de captura radioativa de partícula na posição \underline{r} e energia E
$\phi(x)$	Fluxo escalar de partículas
$\phi(\underline{r}, E, t)$	Fluxo escalar de partículas na posição \underline{r} , com energia E e no tempo t
$\psi(x, \mu)$	Fluxo angular de partículas em x , na direção μ
$\psi(X, \mu)$	Fluxo angular de partículas em X , na direção μ
$\psi_m(x)$	Fluxo angular de partículas em x , na direção μ_m
$\psi_m(X)$	Fluxo angular de partículas em X , na direção μ_m
$\psi_m(s)$	Vetor fluxo angular
$\hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega)$	Seção de choque de espalhamento dependente da energia
D_T	Taxa de dose absorvida
μ_a	Coefficiente de absorção do meio material

SUMÁRIO

	Pág.
Resumo	iv
ABSTRACT	v
LISTA DE SÍMBOLOS.....	vi
LISTA DE TABELAS	xi
1. INTRODUÇÃO	1
2. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL PARA VALORES DISCRETOS DE ENERGIA COM NÚCLEO DE KLEIN-NISHINA.....	7
2.1 Introdução	7
2.2 Formulação	7
2.3 Cálculo da integral em λ pela regra de Simpson 1/3.....	12
3. MÉTODO LTS_N	18
3.1 Introdução	18
3.2 Formulação LTS_N	19
3.3 Inversão da matriz.....	22
3.4 Método da diagonalização.....	26
3.5 Desenvolvimento da equação de transporte multigrupo e multiregiões	28
4. CÁLCULO DE DOSE ABSORVIDA E FATOR DE “BUILDUP”	36
4.1 Fontes Radioativas.....	36
4.2 Definições e conceitos.....	38

4.2a Exposição.....	38
4.2b Dose absorvida	39
4.2c Taxa de dose absorvida	40
4.2d Dose equivalente.....	41
4.3 Cálculo do fator de buildup.....	41
5. METODOLOGIA	44
5.9 Esquema representativo para determinar o fluxo escalar	47
6. RESULTADOS E DISCUSSÃO	48
7. CONCLUSÃO	57
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	59
APÊNDICE A: Dedução da equação de transporte - forma genérica	63
APÊNDICE B: Equação de transporte multigrupo dependente da energia	74
APÊNDICE C: Tabelas dos coeficientes de absorção e atenuação	77

LISTA DE TABELAS

	Pág.
T 6.1 Problema 6.1.....	48
T 6.2 Problema 6.2.....	49
T 6.3 Problema 6.3.....	50
T 6.4 Problema 6.4.....	51
T 6.5 Problema 6.5.....	52
T 6.6 Problema 6.5.....	54
T 6.7 Problema 6.6.....	55
T 6.8 Problema 6.6.....	56
T C.9 Coeficientes de absorção e atenuação (1.25 MeV).....	77
T C.10 Coeficientes de absorção e atenuação (0.66 MeV).....	77
T C.11 Constante α para água e chumbo	78
T C.12 Fatores de peso de radiação.....	78
T C.13 Fatores de peso de tecido.....	78

1. INTRODUÇÃO

Torna-se muito difícil estabelecer, com rigor, onde se iniciam os eventos que antecederam e que se relacionaram com o advento da era nuclear. Algumas datas são importantes de serem estabelecidas, com vistas a situar esses antecedentes nucleares. O ano de 1893 é marcado por ocasião de uma conferência científica internacional na Europa, onde um renomado cientista declarou, com grande receptividade e aprovação, que os físicos haviam terminado sua obra, pois nada mais restava aos cientistas do próximo século, senão repetir as experiências já realizadas. Dois anos mais tarde, veio a primeira das descobertas que abalaram essa declaração, pois em 1895 Roentgen anuncia a descoberta dos raios-X. No ano seguinte, Becquerel descobre a radioatividade natural e, em 1898 o casal Curie anuncia a descoberta do elemento rádio. No início do século XX, Planck introduz o conceito da teoria quântica da energia; Rutherford identifica as emanações do rádio e denomina-as de radiações alfa, beta e gama e introduz a teoria da transmutação nuclear; Einstein apresenta a relação entre massa e energia; Soddy demonstra a existência dos isótopos e uma avalanche de descobertas coroa o meio científico mundial. No acompanhamento de todo esse desenvolvimento científico surge a tecnologia nuclear, que, devido as suas múltiplas aplicações, tornou-se um dos instrumentos de maior importância para a indústria, medicina, agricultura, geração de energia, etc. Mas, para que essa tecnologia possa ser desenvolvida com segurança, deve-se conhecer, dominar e saber aplicá-la, e isso somente se aprende fazendo, pois dificilmente encontra-se disponível no mercado internacional os equipamentos, insumos e o “know-how” necessários ao desenvolvimento independente.

O uso da tecnologia nuclear na área médica é amplamente difundido e trouxe benefícios inquestionáveis a toda a sociedade. Dentre as principais aplicações pode-se citar: radiodiagnóstico, medicina nuclear e radioterapia, que fazem uso de radiação X, gama e elétrons de alta energia.

O uso de radioisótopos na indústria tem se revelado como um fator fundamental de desenvolvimento. Uma das técnicas mais empregadas atualmente, é a de usar fontes de radiação gama no controle de qualidade. Essa técnica, denominada gamagrafia, é não destrutiva, sendo empregada no controle de solda, peças de fundição, e outros testes na mecânica naval, na indústria do petróleo, nas siderúrgicas, etc. A radiação nuclear também é empregada como medidores de espessura e gramagem, de recobrimentos, de nível, de densidade de sólidos, de concentração, de vazão, detetores de fumaça, etc.

A história do homem é a história de sua pesquisa em alimentos e de seus cuidados para sua preservação. Antes mesmo que o homem soubesse o que causava a deterioração de seu alimento, ele trabalhou para tentar preveni-la, uma vez que 30 a 40% das colheitas são perdidas antes de atingir a população. O uso de radiação ionizante é o mais recente passo nesse caminho. A radiação ionizante pode preservar alimentos inibindo ou destruindo bactérias e microorganismos, de forma rápida, econômica e segura, sem aumentar as temperaturas internas mais que poucos graus. As principais pesquisas em relação a esse assunto tem por objetivo determinar qual é a dose mais adequada, que cumpram sua finalidade garantindo a integridade dos alimentos.

Irradiando-se os alimentos eles não se tornam radioativo, e com doses baixas de radiação existe uma perda menor de vitaminas do que nos processos de enlatamento, congelamento ou desidratação. Algumas vitaminas são perdidas se doses altas são aplicadas, mas elas podem ser restituídas de outras formas. A

irradiação pode ainda ocasionar em certos alimentos, algumas alterações na textura, cor, sabor e odor. Hoje sabe-se que elas podem ser eliminadas ou substancialmente reduzidas pela irradiação em baixa temperatura. As radiações normalmente usadas para alimentos é a radiação gama. Fontes comumente usadas são Co-60 e feixes de elétrons.

O crescimento da demanda mundial de energia forçou o aparecimento de fontes não convencionais de energia, e deslocou a atenção dos países para a aquisição de fontes renováveis, devido ao crescente esgotamento dos recursos de origem fóssil. Uma dessas fontes consiste na geração de energia, por meio de um reator nuclear. Esse método se baseia na transformação do calor gerado na reação de fissão de nêutrons, realizada e controlada no interior do reator. Essa é uma das formas mais conhecidas de utilização da energia nuclear.

Existem ainda diversas outras utilizações das radiações nucleares, mas as já citadas mostram a importância do domínio dessa tecnologia no momento atual. Ao fazer-se uso de materiais radioativos, aceleradores e outras fontes emissoras de radiação, seja no projeto de um reator nuclear ou de uma sala de radiodiagnóstico ou de medicina nuclear ou no projeto de um irradiador de alimentos, deve-se ter conhecimento da distribuição do fluxo de radiações em diversos pontos de interesse, com a finalidade de determinar parâmetros e grandezas como a espessura e materiais de blindagens, potência do reator, exposição, dose absorvida, dose equivalente, etc. Uma das formas de obter-se o fluxo de radiações é através da solução da equação de transporte de Boltzmann [22] para partículas e fótons. A física do processo de interação da radiação com a matéria é representada por essa equação e, a descrição completa do processo envolve partículas carregadas e neutras em 7 dimensões do espaço de fase, sendo 3 dimensões espaciais, 3 componentes do momento e o tempo.

A equação de transporte constitui-se na ferramenta matemática fundamental para o estudo quantitativo de vários fenômenos físicos associados às radiações. Na área de proteção radiológica essa equação é aplicada, principalmente, no cálculo e análise de blindagens e na dosimetria das radiações.

A complexidade das equações que modelam os processos de interação da radiação com a matéria, assim com o esforço computacional associado com a abordagem probabilística (método Monte Carlo), justificam a necessidade de que sejam adotados métodos determinísticos na abordagem do problema.

A solução exata da equação de transporte somente é possível para casos muito simples e, normalmente, só se obtém soluções aproximadas, mesmo utilizando técnicas numéricas. Esse fato levou ao desenvolvimento de vários métodos de cálculo, entre eles a formulação de modelos aproximados para representar a equação de transporte, para os quais se buscam soluções exatas. Nessa linha de abordagem, um dos mais utilizados é o método das ordenadas discretas (S_N). Nesse método a equação de transporte é calculada sobre um conjunto de direções discretas, sendo associado um peso para cada direção discreta. Um conjunto de equações algébricas é obtido, e estas podem ser resolvidas por procedimentos de recorrência e iterações, ou uma solução analítica pode ser obtida mediante o uso do método LTS_N [1,2,3,4,6,7,13,15,19,20,23].

A formulação LTS_N se baseia na aplicação da transformada de Laplace à variável espacial da equação, resultando em um sistema linear algébrico para o fluxo transformado, que após é invertido analiticamente através da expansão de Heaviside. Este método, tem sido extensivamente utilizado em diversos problemas, desde o da transferência radioativa em nuvens[6,13,14], em cálculo de dose [12,18] e fator de “buildup”, até em cálculos de criticalidade de reatores nucleares do tipo

placas homogêneas com multigrupo de energias [2,3,4]. A formulação LTS_N também foi estendida a problemas multidimensionais (2d e 3d) em coordenadas cartesianas e curvilíneas, obtendo-se os fluxos angulares [23,24,25]. Recentemente essa metodologia foi utilizada para cálculo de dose em meios homogêneos, para valores discretos de energia, considerando o núcleo de Klein-Nishina [12], na modelagem do termo de espalhamento para fótons, devido ao efeito Compton. No trabalho realizado por Trindade [18], foi determinada a dose absorvida e o fator de “buildup”, usando o método LTP_N aplicado à equação de transporte unidimensional em geometria plana, considerando o espalhamento em valores discretos de energia. O núcleo de espalhamento foi descrito pela fórmula de Klein-Nishina para fótons, obtendo-se resultados para meios homogêneos formados de água e de chumbo. Em trabalho posterior, Sauer [12] obteve uma solução para a equação de transporte, considerando multigrupo em energia em placa homogênea com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, para valores discretos de energia, através do método LTS_N , com aplicação da formulação proposta para o cálculo da dose absorvida.

Como os trabalhos realizados para cálculo de dose absorvida e fator de build-up [12,18], usando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, foram desenvolvidos somente para meios homogêneos, propomos a extensão dessa metodologia para meios heterogêneos. Dessa forma, o objetivo do presente trabalho é obter uma solução da equação de transporte de fótons, com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, para valores discretos de energia, através do método LTS_N , para o cálculo de dose absorvida e fator de “buildup”, aplicado em placas heterogêneas e modelo de multigrupo em energias. O termo integral em energia é aproximado, através da regra de Simpson 1/3, e o método LTS_N é aplicado ao sistema resultante, fornecendo uma solução analítica para a variável

espacial. A intensidade do fluxo escalar de energia é obtido, mediante integração na variável angular e, a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup” são obtidos em diversos pontos de blindagem, considerando o tipo de fonte radioativa e sua atividade.

Para atingir esse objetivo, o trabalho está organizado do seguinte modo: no capítulo 2 é apresentado a solução da equação de transporte unidimensional para valores discretos de energia com núcleo de Klein-Nishina. No capítulo 3 é apresentada a equação de transporte em termos da intensidade do fluxo angular em energia e a metodologia LTS_N para solução da aproximação S_N dessa equação. No capítulo 4 é apresentado o cálculo de dose absorvida e “buildup”. No capítulo 5 é apresentada a metodologia. No capítulo 6 são apresentados os resultados e as discussões e no capítulo 7 as conclusões desse trabalho.

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

2.1 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 . 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 . A aproximação que utilizamos para o termo da integral em energia é a Regra de Simpson.

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 [22]

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma_t(\lambda) I(x, \lambda, \mu) = \int_{4\pi} \int_0^\lambda \hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\Omega'. \quad (2.2.1)$$

com fluxo angular de energia $I(x, \lambda, \mu)$ conhecido nas fronteiras. Aqui, $\sigma_t(\lambda)$ representa a seção de choque total e o núcleo de espalhamento é aproximado por uma série finita em termos de polinômios de Legendre, dado por

$$\hat{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \hat{\Sigma}_{\lambda}(\lambda', \lambda) P_{\lambda}(\mu_0), \quad (2.2.2)$$

onde $\mu_0 = \underline{\Omega}' \cdot \underline{\Omega}$ é o co-seno do ângulo de espalhamento.

Observamos, em (2.2.2), que o núcleo de espalhamento é escrito desta forma, porque podemos assumir o espalhamento de fótons como não polarizado 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.

Substituindo (2.2.2) em (2.2.1) resulta

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma_t(\lambda) I(x, \lambda, \mu) \\ = \int_{4\pi} \int_0^{\lambda} \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \hat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu_0) I(x, \lambda', \mu) d\lambda' d\Omega' \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

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

$$P_{\lambda}(\mu_0) = P_{\lambda}(\mu) P_{\lambda}(\mu') + \text{termos contendo } \cos u(\phi - \phi'), \quad u = 1, 2, 3, \dots, K \quad (2.2.4)$$

obtendo, no lado direito da equação (2.2.3),

$$\int_{4\pi} \int_0^\lambda \frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \hat{\Sigma}_\lambda(\lambda', \lambda) P_\lambda(\mu_0) I(x, \lambda', \mu') d\lambda' d\Omega'$$

$$= \int_{-1}^1 \int_0^\lambda \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \hat{\Sigma}_\lambda(\lambda', \lambda) I(x, \lambda', \mu') P_\lambda(\mu) P_\lambda(\mu') d\lambda' d\mu' \quad (2.2.5)$$

Substituindo o resultado encontrado em (2.2.5), na equação (2.2.3), a equação para o fluxo angular resulta

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma_t(\lambda) I(x, \lambda, \mu)$$

$$= \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \int_0^\lambda \hat{\Sigma}_l(\lambda', \lambda) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \quad (2.2.6)$$

O núcleo de espalhamento contido na integral em (2.2.1) pode ser relacionado com a seção de choque de Klein-Nishina para o espalhamento Compton, $K(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega})$ pela expressão

$$\bar{\Sigma}(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) = \frac{\lambda}{\lambda'} K(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}), \quad (2.2.7)$$

onde

$$K(\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) = \frac{3}{16\pi} \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T \left(\frac{\lambda'}{\lambda} \right)^2 \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right]$$

$$\times \delta(1 + \lambda' - \lambda - \underline{\Omega}' \cdot \underline{\Omega}) \quad (2.2.7 a)$$

com α (constante dependente do meio) determinada por

$$\alpha = \frac{N_A Z \rho}{A} \sigma_T = 0,40061 \frac{Z \rho}{A} [\text{cm}^{-1}], \quad (2.2.7 \text{ b})$$

onde

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;

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 = 6,65245 \times 10^{-25} \text{ cm}^2 \quad (2.2.7 \text{ c})$$

a seção de choque de Thomson e, em (2.2.7 a), a função delta de Dirac indica que, para cada comprimento de onda, existe apenas um ângulo espalhado, ou seja

$$\lambda - \lambda' = 1 - \underline{\Omega} \cdot \underline{\Omega}'. \quad (2.2.7 \text{ d})$$

Desta forma, o núcleo de espalhamento em (2.2.6) é tal que

$$\bar{\Sigma}_\lambda(\lambda', \lambda) = \frac{3 N_A Z \rho}{8 A} \sigma_T \frac{\lambda'}{\lambda} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda - \lambda') + (\lambda - \lambda')^2 \right] P_\lambda(1 + \lambda' - \lambda) \quad (2.2.8)$$

ou ainda

$$\bar{\Sigma}_\lambda(\lambda', \lambda) = \alpha K(\lambda', \lambda) P_\lambda(1 + \lambda' - \lambda), \quad (2.2.9)$$

onde

$$K(\lambda', \lambda) = \begin{cases} \frac{3}{8} \frac{\lambda}{\lambda'} \left[\frac{\lambda}{\lambda'} + \frac{\lambda'}{\lambda} - 2(\lambda' - \lambda) + (\lambda' - \lambda)^2 \right] & \text{para } \lambda' \leq \lambda \leq \lambda' + 2 \\ 0 & \text{para } \lambda \notin [\lambda'; \lambda' + 2]. \end{cases} \quad (2.2.10)$$

Finalmente, substituindo (2.2.9) em (2.2.6) obtemos

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \lambda, \mu) + \sigma_t(\lambda) I(x, \lambda, \mu) &= \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_{\lambda'}(1 + \lambda' - \lambda) \\ &\times P_{\lambda}(\mu) \int_{-1}^1 P_{\lambda}(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

A integral em λ , na equação (2.2.11) 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,

$$\lambda_0 = \frac{0,511}{E_0}, \quad (2.2.12)$$

onde E_0 é a energia do fóton incidente no meio, dada em MeV.

Propomos, nesse ponto, a aproximação do termo integral em λ , que aparece na equação (2.2.11), resultando em soluções para cada valor de energia. Assim sendo, apresentamos, a seguir, a regra de Simpson para o tratamento da integral em questão.

2.3 Cálculo da integral em λ pela Regra de Simpson

Usando a fórmula Geral da Regra de Simpson [12]:

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

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

$$\Delta x = \frac{b-a}{n}$$

e

$$x_k = a + k\Delta x, \quad k \in \mathbb{Z}$$

para aproximar a integral em λ , contida na equação (2.2.11) podemos escrever

$$\int_{\lambda}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_{\lambda}(1 + \lambda' - \lambda) P_{\lambda}(\mu) \int_{-1}^1 P_{\lambda}(\mu') I(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda'$$

$$= \frac{\Delta}{3} \sum_{\lambda=1}^{m+1} c_r \alpha K(\lambda_r, \lambda) P_{\lambda}(1 + \lambda_r - \lambda) P_{\lambda}(\mu) \int_{-1}^1 P_{\lambda}(\mu') I(x, \lambda_r, \mu') d\mu' \quad (2.3.1)$$

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,

$$\Delta = \frac{2}{m}, \quad (2.3.1a)$$

$$c_1 = c_{m+1} = 1 \quad \text{e} \quad c_r = \begin{cases} 4 & \text{se } r \text{ for par} \\ 2 & \text{se } r \text{ for ímpar} \end{cases} \quad (2.3.1b)$$

e

$$\lambda_r = \lambda_0 + k.\Delta, k \in \mathbf{Z} \quad (2.3.1c)$$

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 (2.2.11) o resultado obtido em (2.3.1), temos

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu) + \sigma_j I_j(x, \mu) = \frac{\Delta}{3} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_\lambda(1+\lambda_r-\lambda_j) \times P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_\lambda(\mu') I_r(x, \mu') d\mu' \quad (2.3.2)$$

onde,

$j = 1, \dots, M$. Segundo o tratamento proposto à variável λ , o sistema resultante depende agora das variáveis x e ω . Aproximamos, então, o termo integral na equação (2.3.2), por quadratura de Gauss. Assim

$$\mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_j(x, \mu_n) + \sigma_j I_j(x, \mu_n) = \frac{\Delta}{3} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_\lambda(1+\lambda_r-\lambda_j) \times P_\lambda(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_\lambda(\mu_k) I_r(x, \mu_k) W_k \quad (2.3.3)$$

ou

$$\mu_n \frac{\partial}{\partial x} I_{jn}(x) + \sigma_{tj} I_{jn}(x) = \frac{\Delta}{3} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_{\lambda}(1+\lambda_r-\lambda_j) x P_{\lambda}(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_{\lambda}(\mu_k) I_{rk}(x) w_k, \quad (2.3.4)$$

onde w_k são os pesos da quadratura de Gauss.

A equação (2.3.4) é a aproximação S_N para a equação (2.3.2). Neste ponto, então, aplicamos o método LTS_N para solução do sistema resultante. Assim sendo, a Transformada de Laplace, na variável x , aplicada a equação (2.3.4), resulta no sistema de equações algébricas que representamos por

$$s \bar{I}_{jn}(s) + \frac{\sigma_{tj}}{\mu_n} \bar{I}_{jn}(s) - \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} \sum_{r=1}^M c_r \alpha K_{rj} P_{\lambda}(1+\lambda_r-\lambda_j) P_{\lambda}(\mu_n) x \sum_{k=1}^N P_{\lambda}(\mu_k) w_k \bar{I}_{rk}(s) = I_{jn}(0), \quad (2.3.5)$$

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 (2.2.10), assim a equação (2.3.5) 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

$$A_j(s) \bar{I}_{jn}(s) = \bar{I}_{jn}(0) + \bar{Z}_{j-1}(s), \quad (2.3.6)$$

onde os elementos da matriz $A_j(s)$, ($N \times N$), para cada valor de energia, j , têm a forma

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\sigma_{tj}}{\mu_p} - \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_\lambda(\mu_p) P_\lambda(\mu_p) w_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_\lambda(\mu_p) P_\lambda(\mu_q) w_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (2.3.7a)$$

Além disso

$$\bar{I}_{jn}(s) = [\bar{I}_{j1}(s) \quad \bar{I}_{j2}(s) \quad \dots \quad \bar{I}_{jN}(s)]^T, \quad (2.3.7b)$$

$$\bar{I}_{jn}(0) = [\bar{I}_{j1}(0) \quad \bar{I}_{j2}(0) \quad \dots \quad \bar{I}_{jN}(0)]^T, \quad (2.3.7c)$$

e

$$\bar{Z}_{j-1}(s) = \sum_{i=1}^{j-1} H_i \bar{I}_{in}(s), \quad (2.3.7d)$$

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

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_\lambda(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_\lambda(\mu_p) P_\lambda(\mu_p) w_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\lambda=0}^L \frac{2\lambda+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_\lambda(1 + \lambda_i - \lambda_j) P_\lambda(\mu_p) P_\lambda(\mu_q) w_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (2.3.7e)$$

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

$$\bar{I}_{jn}(s) = A_j^{-1}(s)I_{jn}(0) + A_j^{-1}(s) \bar{Z}_{j-1}(s), \quad (2.3.8)$$

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

$$\bar{I}_{1n}(s) = A_1^{-1}(s)I_{1n}(0)$$

$$\bar{I}_{2n}(s) = A_2^{-1}(s)I_{2n}(0) + A_2^{-1}(s) \bar{Z}_2(s) = A_2^{-1}(s)I_{2n}(0) + A_2^{-1}(s)H_1\bar{I}_{1n}(s),$$

$$\bar{I}_{3n}(s) = A_3^{-1}(s)I_{3n}(0) + A_3^{-1}(s) \bar{Z}_3(s),$$

ou

$$\bar{I}_{3n}(s) = A_3^{-1}(s)I_{3n}(0) + A_3^{-1}(s) [H_1 \bar{I}_{1n}(s) + H_2 \bar{I}_{2n}(s)],$$

e assim, sucessivamente, até a energia M .

A transformada inversa de Laplace, aplicada a equação (2.3.8) nos dá o fluxo angular de energia, em função de x , para a energia j , na direção n , isto é,

$$I_{jn}(x) = L^{-1}\{A_j^{-1}(s)I_{jn}(0)\} + L^{-1}\{A_j^{-1}(s)\bar{Z}_{j-1}(s)\} \quad (2.3.9)$$

Obtida a matriz inversa $A_j^{-1}(s)$, a transformada inversa do primeiro termo do segundo membro da equação(2.3.9), pode ser obtida através da técnica de expansão de Heaviside e para o segundo termo, usamos a propriedade da convolução, ou também a técnica de expansão de Heaviside; conseqüentemente, o fluxo angular de energia será dado por

$$I_{jn}(x) = \sum_{k=1}^N \beta_k e^{s_k x} + Z_{j-1}(x) * L^{-1}\{A_j^{-1}(s)\} \quad (2.3.10)$$

$$\text{onde } \beta_k = \left[\frac{s_k^{N-1} P_{N-1} + s_k^{N-2} P_{N-2} + \dots + s_k P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_N(s)]_{s=s_k}} \right] I(0),$$

e

$$\mathbf{Z}_{j-1}(x) = \mathbf{H}_i \mathbf{l}_{j-1,n}(x), \quad (2.3.11)$$

Com \mathbf{H}_i de elementos dados por (2.3.7e).

3. O MÉTODO LTS_N

3.1 Introdução

O método LTS_N [21] apresenta uma solução analítica para o problema de ordenada discreta unidimensional e multigrupo de transporte de nêutrons e fótons em simetria planar. Essa formulação tem por princípio a aplicação da transformada de Laplace em um conjunto de equações de ordenadas discretas (equações S_N), determinando um sistema algébrico que pode ser resolvido analiticamente para os fluxos angulares transformados, sendo então aplicada a técnica de expansão de Heaviside para determinação dos fluxos angulares. Essa formulação também soluciona problemas de ordenadas discretas bidimensionais e tridimensionais em geometria cartesiana [24]. Para isso, as equações S_N bidimensionais e tridimensionais são transformadas, por integração, em um conjunto de duas ou três equações S_N unidimensionais, denominadas equações integradas transversas, que podem então ser solucionadas pela aplicação da formulação LTS_N unidimensional. Assim, o método foi inicialmente desenvolvido para resolver problemas de ordenadas discretas multidimensionais restritos a sistemas de coordenadas cartesianas. A generalização deste método para sistemas ortogonais curvilíneos é de grande interesse, a sua extensão para problemas de ordenadas discretas bidimensionais em um domínio convexo foi possível aplicando-se transformação conforme para mapear o círculo do retângulo [25]. Além disto, problemas S_N sem simetria azimutal também foram solucionados [7,14]. Recentemente foi provada a convergência deste método usando teoria de semigrupos, bem como desenvolvido um método recursivo para inversão de matriz LTS_N de ordem elevada. Esse método também tem sido utilizado para solução de problemas de criticalidade de reatores

nucleares [2,3,7], em problemas de cálculo de espessura [4] e cálculo de dose [5,8,12,19,20].

3.2 Formulação LTS_N

Nesta seção descreve-se brevemente o método LTS_N, para tal, considera-se o problema de ordenadas discretas:

$$\mu_m \frac{d}{dx} I_m(x) + \sigma_t I_m(x) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{K=1}^N \sigma^{mK} I_K(x) \omega_K + Q_m(x), \quad (3.1)$$

onde, $x \in [0,a]$ é a variável espacial, $\mu \in [-1,1]$ é o cosseno do ângulo polar, $m=1,\dots,N$, N par, e condições de contorno,

$$I_m(0) = f_m, \quad \mu_m > 0 \quad (3.2)$$

e

$$I_m(a) = g_m, \quad \mu_m < 0. \quad (3.3)$$

Aqui, f_m e g_m são os fluxos incidentes na fronteira do domínio; $I_m(x) = I(x, \mu_m)$ representa o fluxo angular na direção μ_m ; $Q_m(x) = Q(x, \mu_m)$ é o termo de fonte; σ_t é a seção de choque total; σ_s é a seção de choque de espalhamento diferencial;

μ_m são as raízes do polinômio de Legendre de n-ésimo grau, são simétricas e ordenadas tal que

$$-1 < \mu_N < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1 < 1$$

e ω_k são os respectivos pesos da quadratura de Gauss –Legendre, ainda σ^{mk} é da forma:

$$\sigma^{mk} = \sum_{\lambda=0}^L \beta_{\lambda} P_{\lambda}(\mu_k) P_{\lambda}(\mu_m), \quad (3.4)$$

sendo β_{λ} os coeficientes da expansão dos polinômios de Legendre.

A equação (3.1) pode ser escrita na forma matricial como,

$$\frac{d}{dx} I(x) + AI(x) = S(x) \quad (3.5)$$

com condições de contorno,

$$I_1(0) = f, \quad (3.6)$$

$$I_2(a) = g, \quad (3.7)$$

onde A é uma matriz $N \times N$, da forma,

$$a_{ij} = \begin{cases} \frac{\sigma_t}{\mu_i} - \frac{\sigma_s \omega_j}{2\mu_i} \sum_{\lambda=0}^L \beta_\lambda P_\lambda(\mu_i) P_\lambda(\mu_j) & \text{se } i = j, \\ -\frac{\sigma_s \omega_j}{2\mu_i} \sum_{\lambda=0}^L \beta_\lambda P_\lambda(\mu_i) P_\lambda(\mu_j) & \text{se } i \neq j, \end{cases} \quad (3.8)$$

para $i, j = 1 : N$. Os vetores $I(x)$ e $S(x)$ são expressos como:

$$I = [I_1(x) \quad I_2(x)]^T, \quad (3.9)$$

sendo $I_1(x)$ e $I_2(x)$ vetores cujas componentes representam o fluxo angular nas respectivas direções discretas positivas e negativas e o vetor fonte com componentes:

$$S(x) = \frac{Q(x, \mu_i)}{\mu_i}, \quad i=1 : N. \quad (3.10)$$

Conhecida a solução LTS_N do problema (3.1) o fluxo angular pode ser determinado como, [21]:

$$I(x) = B(x) I(0) + H(x), \quad (3.11)$$

onde

$$H(x) = B(x) * S(x) = \int_0^x B(x-\tau) S(\tau) d\tau \quad (3.12)$$

e

$$B(x) = L^{-1} ((sI + A)^{-1}). \quad (3.13)$$

Para determinar as componentes desconhecidas do vetor $I(0)$, escreve-se a equação (3.11) na forma de matrizes em bloco,

$$\begin{bmatrix} I_1(x) \\ I_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11}(x) & B_{12}(x) \\ B_{21}(x) & B_{22}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1(0) \\ I_2(0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \end{bmatrix}, \quad (3.14)$$

aplica-se a condição de contorno (3.7) na equação (3.11) em $x = a$, encontrando:

$$I_2(0) = B_{22}^{-1}(a) [I_2(a) - B_{21}(x)I_1(0) - H_2(a)]. \quad (3.15)$$

Com isso determina-se o vetor $I_2(0)$ e, conseqüentemente, calcula-se o vetor fluxo angular dado pela expressão (3.11).

A inversa da matriz $(sI + A)$ pode ser feita pelo algoritmo de Schur descrito na próxima seção, ou pelo método da diagonalização.

3.3 Inversão da matriz $\bar{A}_n(s)$

Nesta seção apresenta-se os processos utilizados para a inversão da matriz simbólica gerada pela aplicação da transformada de Laplace.

Considera-se a matriz,

$$\bar{A}_n(s) = sI + A, \quad (3.16)$$

cuja inversa

$$\bar{A}_N^{-1}(s) = (sI + A)^{-1}, \quad (3.17)$$

deseja-se determinar. Aplica-se à matriz A , a fatoração de Schur [16] segundo a qual, para qualquer matriz quadrada A , existe uma matriz unitária U tal que o produto $U^{-1}AU = T$ é uma matriz triangular superior. Podemos, então, escrever:

$$A = UTU^T \quad (3.18)$$

e, substituindo (3.18) em (3.17), temos

$$A_N^{-1}(s) = (sUU^T + UTU^T)^{-1} \quad (3.19)$$

ou

$$A_N^{-1}(s) = (U(sI + T)U^T)^{-1} \quad (3.20)$$

ou ainda

$$A_N^{-1}(s) = (U^T)^{-1}(sI + T)^{-1}U^{-1} \quad (3.21)$$

Finalmente,

$$A_N^{-1}(s) = U(sI + T)^{-1}U^T \quad (3.22)$$

onde a matriz $sI + T$ tem a forma

$$sI + T = \begin{bmatrix} s+t_{11} & t_{12} & \Lambda & t_{1N} \\ 0 & s+t_{22} & \Lambda & t_{2N} \\ M & 0 & O & M \\ 0 & 0 & \Lambda & s+t_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

e pode-se observar que

$$\Delta_N \equiv \det(sI + T) = \prod_{i=1}^N (s + t_{ii}). \quad (3.24)$$

Com o objetivo de determinar a inversa da matriz $(sI+T)$, define-se,

$$S_1 \equiv [s + t_{11}], \quad (3.25)$$

$$S_2 \equiv \begin{bmatrix} s+t_{11} & t_{12} \\ 0 & s+t_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1 & t_{12} \\ 0 & s+t_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

$$S_3 \equiv \begin{bmatrix} s+t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ 0 & s+t_{22} & t_{23} \\ 0 & 0 & s+t_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_2 & t_{13} \\ 0 & 0 & s+t_{33} \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

de forma que, genericamente,

$$S_K \equiv \begin{bmatrix} s+t_{11} & t_{12} & t_{13} & K & t_{1K} \\ 0 & s+t_{22} & t_{23} & \Lambda & t_{2K} \\ 0 & 0 & s+t_{33} & \Lambda & t_{3K} \\ 0 & 0 & 0 & O & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda & s+t_{KK} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & t_{1k} \\ & & & & t_{2K} \\ & S_{k-1} & & & t_{3K} \\ & & & & \Lambda \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & s+t_{KK} \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

onde $S_K \equiv sI + Tek = 2 : N$. Usa-se, então a propriedade de matrizes em bloco:

$$\begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} B^{-1} & -B^{-1}CD^{-1} \\ 0 & D^{-1} \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

obtendo-se a inversa da matriz S_k que pode ser representada por

$$S_K^{-1} = \begin{bmatrix} S_{K-1}^{-1} & -\frac{S_{K-1}^{-1}v}{s+t_{KK}} \\ 0 & \Lambda & 0 & \frac{1}{s+t_{KK}} \end{bmatrix}, \quad (3.30)$$

e o vetor v é dado por

$$v = \begin{bmatrix} t_{1K} & t_{2K} & \Lambda & t_{(K-1)K} \end{bmatrix}^T. \quad (3.31)$$

Dessa forma, tem-se determinada, a matriz $A_N^{-1}(s)$, definida em (3.22).

Para efetuar a inversão da transformada de Laplace da matriz $sI+T$, é necessário encontrar sua matriz adjunta. Assim, multiplica-se as equações (3.30) e (3.31), obtendo :

$$\text{Adj}(S_k) = S_k^{-1} \det(s_k) = \begin{bmatrix} \text{Adj}(S_{k-1})(s + t_{kk}) & -\text{Adj}(S_{k-1})v \\ 0 & L & 0 & \det(S_{k-1}) \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Finalmente usa-se a técnica de expansão de Heaviside e encontra-se a seguinte expressão para a matriz inversa $(sI+A)$:

$$L^{-1}((sI + A)^{-1}) = U \left[\sum_{l=1}^N \frac{\text{Adj}(S_N)|_{s=s_l}}{\frac{d}{ds}(\Delta_N)|_{s=s_l}} e^{s_l t} \right] U^T. \quad (3.33)$$

3.4 Método da diagonalização

O método da diagonalização [15] também permite inverter a matriz simbólica $(sI+A)$. Para tal, decompõe-se a matriz A como:

$$A = XDX^{-1}, \quad (3.40)$$

onde D é uma matriz diagonal de autovalores e X é uma matriz de autovetores correspondentes. Então,

$$\begin{aligned} B(x) &= L^{-1} ((sXX^{-1} + XDX^{-1})^{-1}) \\ &= XL^{-1} ((sI + D)^{-1}) X^{-1} \\ &= Xe^{-Dx}X^{-1}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

O método da diagonalização é aplicável para obter o fluxo de fótons e nêutrons em placa com espessura grande. Muitas vezes, o aumento da espessura da placa ou da ordem da quadratura ocasionam problemas de overflow. Para eliminar tal problema decompõe-se a solução LTS_N em homogênea e particular, que contém somente direções positivas, $\mu_k > 0$ e negativas $\mu_k < 0$ [10]. É necessário lembrar-se que as direções discretas que μ_k são simétricas ao redor de $\mu=0$. Assim, fisicamente falando, isto corresponde a considerar a partícula viajando da direita para a esquerda com $\mu_k < 0$ e o mesmo para a partícula viajando da esquerda para a direita com $\mu_k > 0$. Esta propriedade é conhecida como propriedade da invariância das direções discretas [9]. Dessa forma, tem-se:

$$\begin{aligned}
 B(x) &= X e^{Dx} X^{-1} \\
 &= X e^{D^+x} X^{-1} + X e^{D^-x} X^{-1} \\
 &= B^+(x) + B^-(x),
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

cujos elementos das matrizes D^+ e D^- são da forma:

$$d_{ij}^+ = \begin{cases} d_{ij} & d_{ij} < 0 \\ 0 & d_{ij} > 0 \end{cases} \tag{3.43}$$

$$d_{ij}^- = \begin{cases} d_{ij} & d_{ij} > 0 \\ 0 & d_{ij} < 0 \end{cases} \tag{3.44}$$

com d_{ij} os elementos da matriz D .

Utilizando-se da propriedade da invariância e a decomposição da matriz $B(x)$, descrita acima, a solução LTS_N pode ser escrita como:

$$I(x) = B^+(x - x_0)I(x_0) + B^-(x)I(0) + H(x), \quad (3.45)$$

onde

$$H(x) = \int_{x_0}^x B^+(x - \tau)S(\tau)d\tau + \int_0^x B^-(x - \tau)S(\tau)d\tau \quad (3.46)$$

Para determinar as componentes desconhecidas $I_2(0)$ e $I_1(x_0)$ dos vetores $I(0)$ e $I(x_0)$ respectivamente, aplica-se as condições de contorno (3.6) e (3.7) encontrando:

$$\begin{bmatrix} I_1(x_0) \\ I_2(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11}^+(0) & B_{12}^-(0) \\ B_{21}^+(x_0) & B_{22}^-(x_0) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (I - B_{11}^-(0))I_1(0) - B_{12}^+(0)I_2(x_0) - H_1(0) \\ (I - B_{22}^+(x_0))I_2(x_0) - B_{21}^-(x_0)I_1(0) - H_2(x_0) \end{bmatrix}, \quad (3.47)$$

neste ponto é importante salientar que todos os argumentos das exponenciais são negativos, portanto não existe problemas de overflow.

3.5 Desenvolvimento da Equação de Transporte, modelo de multigrupo e multiregiões com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina.

A seguir é feito o desenvolvimento da equação de transporte para duas regiões e cinco grupos de energia por Simpson 1/3.

Para $M=m+1$:

$$\mu_n \frac{d}{dx} I_{jn}(x) + \sigma_j I_{jn}(x) = \frac{\Delta}{3} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M C_r \alpha K_{rj} * P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_{rk}(x) w_k \quad (3.5.1)$$

dividindo por μ_n temos:

$$\frac{d}{dx} I_{jn}(x) + \frac{\sigma_j}{\mu_n} I_{jn}(x) = \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{r=1}^M C_r \alpha K_{rj} * P_l(1 + \lambda_r - \lambda_j) P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N P_l(\mu_k) I_{rk}(x) w_k \quad (3.5.2)$$

fazendo $N=2$ e $M=5$; $j=1, \dots, M$ e $n=1, 2$.

Para $n=1$ e $j=1$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_{11}(x) + \frac{\sigma_1}{\mu_1} I_{11}(x) = & \frac{\Delta}{6\mu_1} \left[c_1 \alpha k_{11} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_1) P_0(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{1k}(x) w_k + c_2 \alpha k_{21} P_0(1 + \lambda_2 - \lambda_1) P_0(\mu_1) \right. \\ & \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{2k}(x) w_k + c_3 \alpha k_{31} P_0(1 + \lambda_3 - \lambda_1) P_0(\mu_1) \\ & \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{3k}(x) w_k + c_4 \alpha k_{41} P_0(1 + \lambda_4 - \lambda_1) P_0(\mu_1) \\ & \left. \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{4k}(x) w_k + c_5 \alpha k_{51} P_0(1 + \lambda_5 - \lambda_1) P_0(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{5k}(x) w_k \right] \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_{11}(x) + \frac{\sigma_1}{\mu_1} I_{11}(x) = & \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_l(\mu_1) P_0(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) I_{12}(x) w_2 \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

Para $n=2$, temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_{12}(x) + \frac{\sigma_1}{\mu_2} I_{12}(x) = \\ \frac{\Delta}{6\mu_2} \left[c_1 \alpha k_{11} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_1) P_0(\mu_2) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{1k}(x) w_k + c_2 \alpha k_{21} P_0(1 + \lambda_2 - \lambda_1) P_0(\mu_2) \right. \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

$$\begin{aligned} \left. \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{2k}(x) w_k + c_3 \alpha k_{31} P_0(1 + \lambda_3 - \lambda_1) P_0(\mu_2) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{3k}(x) w_k + c_4 \alpha k_{41} P_0(1 + \lambda_4 - \lambda_1) P_0(\mu_2) \right. \\ \left. \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{4k}(x) w_k + c_5 \alpha k_{51} P_0(1 + \lambda_5 - \lambda_1) P_0(\mu_2) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{5k}(x) w_k \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_{12}(x) + \frac{\sigma_1}{\mu_2} I_{12}(x) = \\ \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_1(\mu_2) P_0(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_2) I_{12}(x) w_2 \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

Montando a matriz A do 1º grupo de energia:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} I_{11}^*(x) \\ I_{12}^*(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\sigma_1}{\mu_1} - \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) w_1 & -\frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) w_2 \\ -\frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_1) w_1 & \frac{\sigma_1}{\mu_2} - \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_2) w_2 \end{bmatrix} \cdot \\ \begin{bmatrix} I_{11}(x) \\ I_{12}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.5.7)$$

Para n=1 e j=2 temos:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{21}(x) + \frac{\sigma_2}{\mu_1} I_{21}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} \left[c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{1k}(x) w_k + c_2 \alpha k_{22} P_l(1 + \lambda_2 - \lambda_2) P_l(\mu_1) \right. \\
& \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{2k}(x) w_k + c_3 \alpha k_{32} P_l(1 + \lambda_3 - \lambda_2) P_l(\mu_1) \\
& \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{3k}(x) w_k + c_4 \alpha k_{42} P_l(1 + \lambda_4 - \lambda_2) P_l(\mu_1) \\
& \left. \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{4k}(x) w_k + c_5 \alpha k_{52} P_l(1 + \lambda_5 - \lambda_2) P_l(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{5k}(x) w_k \right]
\end{aligned} \tag{3.5.8}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{21}(x) + \frac{\sigma_2}{\mu_1} I_{21}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_1) P_l(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_1) P_l(\mu_2) I_{12}(x) w_2 \\
& + \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{22} P_l(1) P_l(\mu_1) I_{21}(x) w_1 + \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{22} P_l(1) P_l(\mu_2) P_0(\mu_2) I_{22}(x) w_2
\end{aligned} \tag{3.5.9}$$

Para $n=2$ e $j=2$,

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{22}(x) + \frac{\sigma_2}{\mu_2} I_{22}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_2} \left[c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_2) \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{1k}(x) w_k + c_2 \alpha k_{22} P_l(1 + \lambda_2 - \lambda_2) P_l(\mu_2) \right. \\
& \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{2k}(x) w_k + c_3 \alpha k_{32} P_l(1 + \lambda_3 - \lambda_2) P_l(\mu_2) \\
& \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{3k}(x) w_k + c_4 \alpha k_{42} P_l(1 + \lambda_4 - \lambda_2) P_l(\mu_2) \\
& \left. \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{4k}(x) w_k + c_5 \alpha k_{52} P_l(1 + \lambda_5 - \lambda_2) P_l(\mu_2) \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{5k}(x) w_k \right]
\end{aligned} \tag{3.5.10}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{22}(x) + \frac{\sigma_2}{\mu_2} I_{22}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_2) P_l(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{12} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_l(\mu_2) P_l(\mu_2) I_{12}(x) w_2 \\
& + \frac{\Delta}{6\mu_2} c_2 \alpha k_{22} P_l(1) P_l(\mu_2) P_l(\mu_1) I_{21}(x) w_1 + \frac{\Delta}{6\mu_2} c_2 \alpha k_{22} P_l(1) P_l(\mu_2) P_l(\mu_2) I_{22}(x) w_2 \quad (3.5.11)
\end{aligned}$$

Montando a matriz A do 2º grupo de energia:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} I_{11}^*(x) \\ I_{12}^*(x) \\ I_{21}^*(x) \\ I_{22}^*(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\sigma_1}{\mu_1} - \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) w_1 & -\frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) w_2 \\ -\frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_1) w_1 & \frac{\sigma_1}{\mu_2} - \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{11} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_2) w_2 \\ -\frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{12} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) w_1 & -\frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{12} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) w_2 \\ -\frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{12} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_0(\mu_2) P_0(\mu_1) w_1 & -\frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{12} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_2) P_0(\mu_2) P_0(\mu_2) w_2 \end{bmatrix} \\
& \dots \quad 0 \quad \quad \quad 0 \\
& \dots \quad 0 \quad \quad \quad 0 \\
& \dots \quad \frac{\sigma_2}{\mu_1} - \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{22} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) w_1 \quad \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{22} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) w_2 \\
& \dots \quad \frac{\Delta}{6\mu_2} c_2 \alpha k_{22} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_1) w_1 \quad \frac{\sigma_2}{\mu_2} - \frac{\Delta}{6\mu_2} c_2 \alpha k_{22} P_0(1) P_0(\mu_2) P_0(\mu_2) w_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_1(x) \\ I_2(x) \\ I_2(x) \\ I_{22}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.12)
\end{aligned}$$

Para j=3 e n=1, temos:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{31}(x) + \frac{\sigma_3}{\mu_1} I_{31}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} \left[c_1 \alpha k_{13} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_3) P_0(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{1k}(x) w_k + c_2 \alpha k_{23} P_0(1 + \lambda_2 - \lambda_3) P_l(\mu_1) \right. \\
& \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{2k}(x) w_k + c_3 \alpha k_{33} P_l(1 + \lambda_3 - \lambda_3) P_0(\mu_1) \\
& \sum_{k=1}^2 P_l(\mu_k) I_{3k}(x) w_k + c_4 \alpha k_{43} P_0(1 + \lambda_4 - \lambda_3) P_0(\mu_1) \\
& \left. \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{4k}(x) w_k + c_5 \alpha k_{53} P_l(1 + \lambda_5 - \lambda_3) P_0(\mu_1) \sum_{k=1}^2 P_0(\mu_k) I_{5k}(x) w_k \right]
\end{aligned} \tag{3.5.13}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{31}(x) + \frac{\sigma_3}{\mu_1} I_{31}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{13} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_3) P_{0l}(\mu_1) P_0(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_1 \alpha k_{13} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_3) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) I_{12}(x) w_2 \\
& + \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{23} P_0(1 + \lambda_1 - \lambda_3) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) I_{21}(x) w_1 + \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_2 \alpha k_{23} P_0(1 + \lambda_2 - \lambda_3) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) I_{22}(x) w_2 + \\
& + \frac{\Delta}{6\mu_1} c_3 \alpha k_{33} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_1) I_{31}(x) w_1 + \\
& \frac{\Delta}{6\mu_1} c_3 \alpha k_{33} P_0(1) P_0(\mu_1) P_0(\mu_2) I_{32}(x) w_2
\end{aligned} \tag{3.5.14}$$

Para $j=3$ e $n=2$, temos:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} I_{32}(x) + \frac{\sigma_3}{\mu_2} I_{32}(x) = \\
& \frac{\Delta}{6\mu_2} c_1 \alpha k_{13} P_l(1 + \lambda_1 - \lambda_3) P_l(\mu_1) P_l(\mu_1) I_{11}(x) w_1 + \dots
\end{aligned} \tag{3.5.15}$$

Segue o processo anterior, resultando em:

$$\begin{bmatrix} I_{11}^*(x) \\ I_{12}^*(x) \\ I_{21}^*(x) \\ I_{22}^*(x) \\ I_{31}^*(x) \\ I_{32}^*(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 \\ H_2 & A_2 & 0 \\ H_{31} & H_{32} & A_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_{11}(x) \\ I_{12}(x) \\ I_{21}(x) \\ I_{22}(x) \\ I_{31}(x) \\ I_{32}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.16)$$

Seguindo essa metodologia, temos:

Para $j=4$ e $n=2$, temos:

$$\begin{bmatrix} I_{11}^*(x) \\ I_{12}^*(x) \\ I_{21}^*(x) \\ I_{22}^*(x) \\ I_{31}^*(x) \\ I_{32}^*(x) \\ I_{41}^*(x) \\ I_{42}^*(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & A_2 & 0 & 0 \\ H_{31} & H_{32} & A_3 & 0 \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & A_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_{11}(x) \\ I_{12}(x) \\ I_{21}(x) \\ I_{22}(x) \\ I_{31}(x) \\ I_{32}(x) \\ I_{41}(x) \\ I_{42}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.17)$$

Para $j=5$ e $n=2$, temos:

$$\begin{bmatrix} I_{11}^*(x) \\ I_{12}^*(x) \\ I_{21}^*(x) \\ I_{22}^*(x) \\ I_{31}^*(x) \\ I_{32}^*(x) \\ I_{41}^*(x) \\ I_{42}^*(x) \\ I_{51}^*(x) \\ I_{52}^*(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & A_2 & 0 & 0 & 0 \\ H_{31} & H_{32} & A_3 & 0 & 0 \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & A_4 & 0 \\ H_{51} & H_{52} & H_{53} & H_{54} & A_5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_{11}(x) \\ I_{12}(x) \\ I_{21}(x) \\ I_{22}(x) \\ I_{31}(x) \\ I_{32}(x) \\ I_{41}(x) \\ I_{42}(x) \\ I_{51}(x) \\ I_{52}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.19)$$

Essa metodologia pode ser aplicada para um número maior de regiões (n) e energias (j).

CÁLCULO DE DOSE ABSORVIDA E DO FATOR DE “BUILDUP”

4.1 Fontes Radioativas

Na introdução dessa dissertação, citou-se algumas das múltiplas aplicações da radioatividade para o bem estar da sociedade. Mas como toda atividade exercida pelo homem sempre existe um risco associado, o mesmo ocorre com a radiação ionizante, cuja utilização requer o emprego de medidas adequadas, de forma a evitar danos causados pela radiação. Para se proteger da radiação, normalmente se empregam três regras básicas: tempo, distância e o uso de blindagens. Quanto menor o tempo de exposição à radiação menor será a dose absorvida; quanto maior for a distância entre o operador e a fonte radioativa, menor será a dose absorvida. Mas como toda operação que utiliza radiação requer um determinado tempo de exposição a uma certa distância da fonte, então para reduzir a dose a níveis aceitáveis, faz-se uso de blindagens, cujas espessuras devem ser cuidadosamente determinadas. O uso do método LTS_N permite obter a taxa de dose absorvida em qualquer ponto de uma blindagem tipo placa plana homogênea ou heterogênea, como mostraremos no decorrer deste trabalho.

As fontes radioativas tradicionais mais usadas são: fontes de Cobalto-60, Irídio-192 e Césio-137, cujas características de emissão são a seguir citadas.

O cobalto-60, representado como Co-60, emite:

1 raio gama de 1,17 MeV em cada desintegração (100%);

1 raio gama de 1,33 MeV em cada desintegração (100%).

A emissão total é de 2 raios gama com energia de 2,50 MeV. Normalmente nos cálculos se utiliza um valor médio de emissão de 1 raio gama com energia de 1,25 MeV. Dessa forma, em 1 Ci de Co-60 há a seguinte emissão de:

1 Ci de Co-60 = $3,7 \times 10^{10}$ desint/s x 2 raios gama/desint = $7,4 \times 10^{10}$ raios gama/s.

A meia-vida do Co-60 é de 5,3 anos, sendo a constante de taxa de exposição gama (Γ) igual a $1.31 \text{ Rm}^2/\text{hCi}$.

O Iridio-192, representado por Ir-192 emite:

0,07 raios gama de 0,61 MeV em cada desintegração;

0,12 raios gama de 0,60 MeV em cada desintegração;

0,57 raios gama de 0,46 MeV em cada desintegração;

0,85 raios gama de 0,32 MeV em cada desintegração;

0,30 raios gama de 0,31 MeV em cada desintegração;

0,25 raios gama de 0,30 MeV em cada desintegração;

0,04 raios gama de 0,20 MeV em cada desintegração.

A emissão total é de 2,2 raios gama / desintegração com energia total de 2,80 MeV.

Em 1 Ci de Ir-192 = $3,7 \times 10^{10}$ desint/s x 2,2 raios gama/desint = $8,2 \times 10^{10}$ raios gama/s. A meia-vida do Ir-192 é de 74 dias e a constante específica de radiação gama igual a $480 \text{ mR/h.m}^2/\text{Ci}$.

O Césio-137, representado por Cs-137 emite:

0,92 raios gama de 0,66 MeV em cada desintegração (92%).

Desse modo, considera-se que a emissão total é de 0,92 raios gama com energia de 0,66 MeV. Em 1 Ci de Cs-137 = $3,7 \times 10^{10}$ desint/s x 0,92 raios gama/desint = $3,41 \times 10^{10}$ raios gama/s. A meia-vida do Cs-137 é de 30 anos e a constante específica de radiação gama igual a $310 \text{ mR/h.m}^2/\text{Ci}$.

As fontes radioativas emissoras de radiação gama, para uso comercial, ao serem produzidas são encapsuladas em recipientes de aço inoxidável ou alumínio.

A parte ativa pode ter a forma de um cilindro ou esfera, sendo seu diâmetro

variável entre 1 a 8 mm. A altura, no caso de cilindro, também está compreendida entre esses valores.

Geralmente as fontes de Co-60 e Ir-192 são produzidas utilizando-se cobalto e irídio metálico. O $^{137}_{55}\text{Cs}$ é um produto de fissão do Urânio-235 obtido por separação química.

Neste trabalho os cálculos de taxa de dose absorvida e fator de “buildup” de dose foram feitos utilizando-se como simuladores, fontes radioativas de Co-60 e o Cs-137, devido ao fato de serem amplamente utilizados nas mais diversas áreas científicas.

4.2 Definições e conceitos

4.2.a Exposição

Exposição (χ) é definida como sendo a quantidade de radiação X ou gama (γ) tal que, a emissão corpuscular e a ela associada, em um cm^3 de ar, produz no mesmo, íons transportando 1 u.e.s (unidade eletrostática de carga = $3,3 \times 10^{-10}$ C) de cada sinal, nas CNTP.

A unidade de exposição, no SI, é o Coulomb/Kg. A unidade anteriormente utilizada era o Roentgen, de tal forma que $1 \text{ R} = 2,58 \times 10^{-4}$ Coulomb/Kg de ar.

Para liberar 1 e.u.s. em 1 cm^3 de ar são necessários 87,7 erg de energia, sendo que 1R equivale a 87,7 erg/g de ar.

4.2.b Dose Absorvida

A dose absorvida (D) é definida pela relação:

$$D = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dm} \quad (4.1.1)$$

onde $d\bar{\varepsilon}$ é a energia média depositada pela radiação ionizante no elemento de volume de massa dm .

A unidade de dose absorvida no Sistema Internacional é o Joule por Kilograma com o nome especial de Gray(Gy). A relação entre elas $1 \text{ Gy} = 1 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} = 100 \text{ Rad}$.

Neste capítulo, usaremos a formulação proposta no capítulo anterior, para o cálculo da taxa de dose absorvida, a qual é obtida em função da densidade de fluxo escalar de energia $\phi_i(x, \lambda_i)$ e do coeficiente de absorção do meio material μ_{ai} , sendo dada por

$$D_T = \sum_{i=0}^G \mu_{ai} \phi_i(x, \lambda_i) \quad (4.1.2)$$

onde:

μ_{ai} = é o coeficiente de absorção do meio material, dado em cm^2/g e

$\phi_i(x, \lambda_i)$ = fluxo escalar de fótons em energia.

A notação utilizada corresponde a:

$$\mu_{ai} \equiv \mu_a(\lambda_i) \quad (4.1.2a)$$

e

$$\lambda_i = \frac{0.511}{E_i} \quad (4.1.2b)$$

onde o valor 0.511 corresponde a massa de repouso do elétron em unidades de MeV.

O fluxo escalar em energia dado por

$$\phi_i(x, \lambda_i) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda_i, \mu) d\mu \quad (4.1.2c)$$

A relação entre a dose absorvida no ar, dada em Rad, e a exposição, em R, é dada por:

$$D_{\text{ar}} (\text{Rad}) = 0,877 \times (R) \quad (4.1.2d)$$

pois 1 Rad equivale a 100 erg/g de ar.

4.2.c Taxa de Dose Absorvida

A taxa de dose absorvida (\dot{D}) é a variação da dose absorvida por unidade de tempo,

$$\dot{D} = \frac{dD}{dt} \quad (4.1.3)$$

A taxa de dose total absorvida devido a um fluxo de fótons de diferentes energias incidindo em um meio material homogêneo ou heterogêneo, será a soma de todas as taxas de dose descritas pela equação (4.1.2), para cada valor de energia considerado. A taxa de dose absorvida, devido somente ao fluxo incidente em energia é dada por

$$\dot{D}_0(\mu_a x) = \mu_a \phi(x, E_0) \quad (4.1.4)$$

A equação (4.1.4) representa a taxa de dose absorvida produzida pelo feixe incidente de energia, não considerando-se o processo de espalhamento, constituindo-se, portanto, no modelo não espalhado.

4.2.d Dose Equivalente

A dose equivalente no tecido, é dada por:

$$H_T = \sum_R W_R D_{TR} \quad (4.1.5)$$

onde:

D_{TR} é a dose absorvida média no tecido ou órgão T, para uma dada radiação R e

W_R é o fator de peso da radiação, mostrado no apêndice C.

A unidade de dose equivalente no SI é o Joule por Kilograma, com o nome especial de Sievert (Sv).

Cálculo do Fator de “Buildup”

O fator de “buildup” é um termo de correção utilizado em cálculo de blindagem, quando não se considera o termo de espalhamento, ou seja, quando a equação de transporte é aproximada pelo modelo não-espalhado. O fluxo assim obtido é corrigido por este fator que representa a razão da intensidade da radiação primária e a espalhada, em algum ponto do feixe pela radiação primária naquele ponto considerado. Dessa forma, o fator de “buildup” de dose é representado por:

$$B(\mu_0 x) = \frac{\dot{D}_T(\mu_0 x)}{\dot{D}_0(\mu_0 x)} \quad (4.3.1)$$

onde:

$\dot{D}_T(\mu_0 x)$ é a taxa de dose absorvida total, considerando todas as energias, inclusive as das radiações espalhadas e

$\dot{D}_0(\mu_0 x)$ é a taxa de dose absorvida devido ao fluxo incidente, sem considerar as energias das radiações espalhadas,

μ_0 é o coeficiente de atenuação linear para o meio material e para a energia incidente e

x é a espessura do material.

Aproximação do fluxo não espalhado

Praticamente todos os cálculos para atenuação de radiação em barreiras protetoras são feitos com base na aproximação do fluxo não espalhado. Matematicamente significa que o termo de espalhamento na equação de transporte é desprezado, resultando que o fluxo em energia para uma fonte pontual isotrópica é dado por

$$I_0(x, E_0) = \frac{3,7 \cdot 10^{10} A E e^{-\mu x}}{4\pi d^2} \gamma_i(E) \quad \left(\frac{\text{MeV}}{\text{cm}^2 \text{ / s}} \right) \quad (4.2.2)$$

onde:

A é a atividade de uma fonte radioativa emissora gama,

E é a energia da radiação incidente,

d é a distância da fonte ao ponto considerado e

γ_i representa o número de fótons de energia E emitidos por desintegração.

Os resultados obtidos com a equação (4.2.2) são corrigidos pelo fator de “buildup”, para levar em consideração os efeitos do espalhamento.

Outra forma de calcular a taxa de exposição é utilizando a constante específica de radiação gama (Γ), de forma que a taxa de exposição, em R/h, a uma distância (d), devido a uma fonte radioativa de atividade (A) caracterizada por (Γ), é dada por:

$$\dot{X} = \frac{\Gamma A}{d^2} \quad (\text{R/h}) \quad (4.2.3)$$

onde Γ é tabelado para cada fonte radioativa.

Sendo assim, a taxa de dose absorvida no ar, em Rad/h, a uma distância d da fonte pode ser expressa por:

$$\dot{D}_{ar} = \frac{\Gamma A}{d^2} \cdot 0,877 \quad (\text{Rad/h}) \quad (4.2.3)$$

onde o fator 0,877 representa a conversão entre Rad e R.

Se for colocado uma barreira protetora de espessura x e coeficiente de atenuação μ e considerando o espalhamento através do fator de “buildup”, a taxa de dose absorvida é dada por:

$$\dot{D} = 0,877 \cdot B(\mu x) \frac{\Gamma A}{d^2} e^{-\mu x}. \quad (4.2.4)$$

A equação (4.2.4) é normalmente utilizada nos cálculos de blindagem como estimativa da taxa de dose absorvida.

5 . METODOLOGIA

Este trabalho tem como objetivo a determinação da taxa de dose total absorvida e do fator de “buildup” de dose, em meios materiais como a água e o chumbo, devido a fonte de radiação gama como o cobalto (Co-60) e o césio (Cs-137), utilizando o método LTS_N com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina. A metodologia utilizada para obter essas quantidades, segue as etapas:

- 5.1** Escolha da fonte radioativa: Co- 60 ou Cs-137. A escolha da fonte implica na definição da energia da radiação gama do feixe não espalhado e no número de fótons gama de energia emitidos por desintegração.
- 5.2** Atividade da fonte radioativa. A atividade da fonte está associada ao fluxo de fótons incidentes no meio material.
- 5.3** Distância da fonte radioativa ao meio material usado com blindagem. Considerando uma fonte pontual isotrópica, a distância da fonte ao meio está associada ao fluxo de fótons incidentes no meio material.
- 5.4** Conhecendo o tipo de fonte radioativa, a atividade da fonte e a distância da fonte ao meio espalhador, determina-se a condição de contorno em $x=0$, ou seja, a intensidade de fluxo angular de energia incidente no meio material tipo placa plana homogênea ou heterogênea. Para obter essa condição de contorno, utilizou-se a equação para intensidade de fluxo angular de energia devido a fonte pontual isotrópica e aproximação de fluxo não espalhado. Isto significa que na placa penetra radiação gama somente com a energia proveniente da fonte sem espalhamento, sendo que a intensidade de fluxo angular de energia incidente para qualquer outra energia é nula.

- 5.4** Estabelece-se que no final da placa não há penetração de radiação com qualquer energia, ou seja, como condição de contorno estabelece-se que a intensidade de fluxo angular de energia incidente no final da placa é nula.
- 5.5** Escolha do meio material espalhador: água ou chumbo. Estes dois materiais foram escolhidos para as simulações por serem utilizados em blindagens e por serem amplamente utilizados na literatura. A escolha do meio material implica na determinação dos coeficientes de atenuação total e de absorção em função da energia, pois o termo integral em energia da equação é aproximado pela regra de Simpson e para cada energia é necessário conhecer os valores dos coeficientes;
- 5.6** Determinação da espessura do meio material. A escolha das espessuras do meio material foram feitas de forma a ter-se um número inteiro de livres caminhos médios ($\mu_0 x$) para uma dada energia incidente da radiação e com isso comparar os resultados com os da literatura;
- 5.7** De posse desses dados, resolve-se a equação LTS_N obtendo-se a intensidade de fluxo escalar de energia em qualquer ponto da placa. Na solução dessa equação, o termo integral em energia foi aproximado pela regra de Simpson, considerado 5 grupos em energia e para a variável angular utilizou-se $N=6$;
- 5.8** Obtida a intensidade de fluxo escalar de energia, a mesma é utilizada para determinar a taxa de dose total absorvida e o fator de “buildup” de dose.

Para desenvolver este trabalho o uso de um microcomputador é indispensável, devido a complexidade dos cálculos. Dessa forma, utilizou-se a linguagem de programação Fortran - 90. Com todos seus recursos internos e bibliotecas (Lapack).

Criou-se um programa principal associado a subrotinas, que serão descritas a seguir.

1º. GALEG - calcula-se os pesos e as raízes da quadratura de Gauss-Legendre.

2°. GERA A - Gera uma matriz A, para cada grupo, utilizando-se os pesos, as raízes e os coeficientes de interação.

3°. GERA B - Gera uma matriz B, para cada grupo, utilizando-se os pesos, as raízes e os coeficientes de interação.

4°. GERA BLOCO A - Gera a matriz bloco da região A, utilizando as Gera A anteriores e as Gera H.

5°. GERA BLOCO B - Gera a matriz bloco da região B, utilizando as Gera B anteriores e as Gera H.

6°. CALC_DADOS_A1 - calcula-se os autovalores, os autovetores e a inversa dos autovetores da matriz A, obtendo-se assim a matriz inversa, considerando-se a espessura da placa e com o auxílio da Lapack.

7°. CALC_DADOS_A2 - calcula-se os autovalores, os autovetores e a inversa dos autovetores da matriz B, obtendo-se assim a matriz inversa, considerando-se a espessura da placa e com o auxílio da Lapack.

8°. MATRIB – Calcula o valor de $\psi(0)$, das duas regiões, do sistema de equações lineares utilizando-se Gauss, considerando-se a matriz B e as condições de contorno de cada região do problema proposto.

9°. FLUXO_ANG – Calcula o fluxo angular num ponto qualquer, após obtido o $\psi(0)$ e considerando a matriz B.

10°. FLUXO_ESC – Calcula o fluxo escalar num ponto qualquer, com o auxílio do fluxo angular e os pesos da quadratura de Gauss. O esquema representativo apresentado na figura 5.1, resume, em linhas gerais, o processo descrito acima.

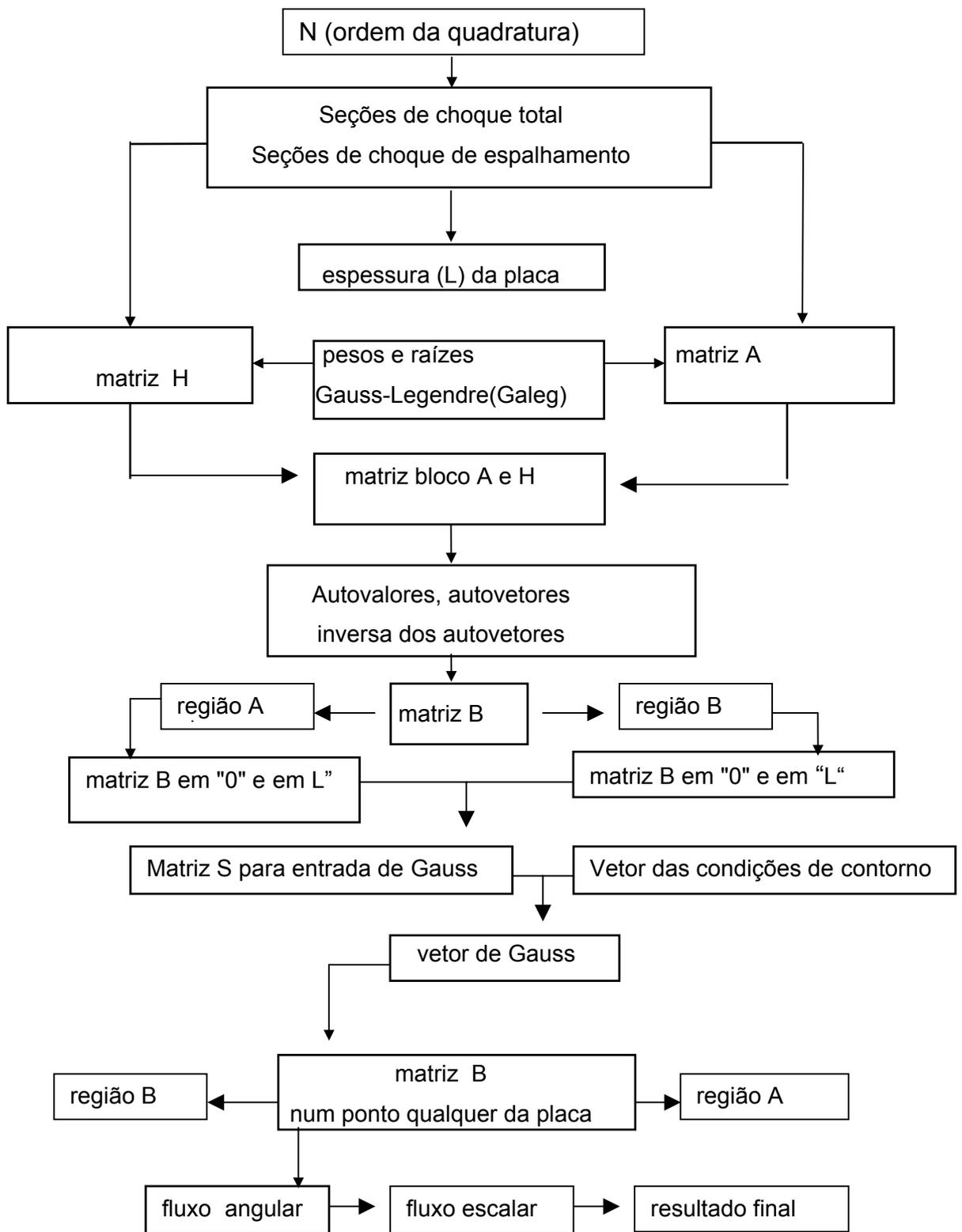


Figura 5.1- Esquema representativo para determinação do fluxo escalar em energia.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados as simulações numéricas obtidas com a aplicação da metodologia proposta para determinação da intensidade de fluxo escalar de energia e cálculo da taxa de dose absorvida e do fator de "buildup" de dose, devido a radiação gama, proveniente de fontes de Co-60 e de Cs-137, incidentes em placas planas homogêneas e heterogêneas formadas de água e de chumbo. As simulações foram realizadas para 5 grupos em energia e aproximação para $N=6$.

Problema 6.1- Simulação para fonte de Co-60 em meio espalhador homogêneo formado por água.

Considere uma fonte pontual isotrópica de Co-60, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana homogênea de água e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida e o fator de "buildup" de dose em função da espessura da placa, expressa em livre caminho médio (μx), para a energia incidente da radiação.

Os resultados obtidos para o problema 6.1 encontram-se na tabela 6.1 para $\mu x=1$ e $\mu x=2$. Os coeficientes de atenuação e de absorção, em função da energia e do meio, encontram-se no apêndice desse trabalho. Os resultados de taxa de dose absorvida, em mGy/h, foram comparados com os cálculos tradicionais que empregam a equação (4.2.4) e os fatores de "buildup" foram comparados com os obtidos na literatura [5,11] e que fazem parte da tabela.

Tabela 6.1 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.1.

μX	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.) (C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	7.76	1.95	8.87	2.16	0.87	0.90
2	3.62	3.19	4.90	3.20	0.74	0.99

Comparando os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida, usando o método LTS_N , com o método tradicional representado pela equação (4.2.4), verifica-se que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina simulam muito bem o problema proposto, pois na equação (4.2.4) o fator de “buildup” corrige em mais de 100% o valor da taxa de dose, ao passo que a metodologia proposta fornece o valor da taxa de dose absorvida sem termos de correção. Os valores obtidos poderiam ser melhorados, ou seja, se aproximarem mais do valor tradicional, se fossem considerados mais termos em energia, pois os cálculos foram feitos com 5 termos em energia usando a regra de Simpson. Quanto ao fator de “buildup”, os resultados obtidos pelo método LTS_N , reproduzem muito bem os publicados na literatura.

Problema 6.2- Simulação para fonte de Co-60 em meio espalhador homogêneo formado por chumbo.

Considere uma fonte pontual isotrópica de Co-60, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana homogênea de chumbo e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup” de dose em função da espessura da placa expressa em livre caminho médio para a energia incidente da radiação.

Os resultados obtidos para o problema 6.2 encontram-se na tabela 6.2 para $\mu x=1$ e $\mu x=2$. Os coeficientes de atenuação e de absorção, em função da energia e do meio, encontram-se no apêndice desse trabalho. Os resultados de taxa de dose absorvida, em mGy/h, foram comparados com os cálculos tradicionais que empregam a equação (4.2.4) e os fatores de “buildup” foram comparados com os obtidos na literatura [5,11] e que fazem parte da tabela.

Tabela 6.2 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.2.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	6.71	1.84	5.79	1.39	1.16	1.32
2	2.10	1.98	2.60	1.70	0.81	1.17

Comparando os resultados obtidos tanto para a taxa de dose absorvida como para o fator de “buildup”, obtidos pelo método LTS_N , com os calculados pelo método tradicional e o fator de “buildup” publicados na literatura, pode-se afirmar que a metodologia proposta apresenta resultados compatíveis com os utilizados em projetos de blindagens.

Problema 6.3- Simulação para fonte de Cs-137 em meio espalhador homogêneo formado por água.

Considere uma fonte pontual isotrópica de Cs-137, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana homogênea de água e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida

e o fator de build-up de dose em função da espessura da placa expressa em livre caminho médio para a energia incidente da radiação.

Os resultados obtidos para o problema 6.3 encontram-se na tabela 6.3 para $\mu x=1$ e $\mu x=2$. Os coeficientes de atenuação e de absorção, em função da energia do Cs-137 e do meio absorvedor, encontram-se no apêndice desse trabalho. Os resultados de taxa de dose absorvida, em mGy/h, foram comparados com os cálculos tradicionais que empregam a equação (4.2.4) e os fatores de “buildup” foram comparados com os obtidos na literatura [5,11] e que fazem parte da tabela.

Tabela 6.3 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.3, sendo a fonte de Cs-137 e meio água.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	2.29	2.31	2.54	2.54	0,90	0.91
2	0.90	3.29	1.50	4.07	0,60	0.81

Comparando os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida e fator de “buildup”, para espessura $\mu x=1$, verifica-se que os resultados concordam muito bem com os obtidos tradicionalmente, já os resultados para $\mu x=2$, podem chegar a representar somente 60% da taxa de dose absorvida. Espera-se que estes resultados melhorem, a medida que acrescentar-se uma quantidade maior de valores no termo de espalhamento em energia.

Problema 6.4- Simulação para fonte de Cs-137 em meio espalhador homogêneo formado por chumbo.

Considere uma fonte pontual isotrópica de Cs-137, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana

homogênea de chumbo e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida e o fator de build-up de dose em função da espessura da placa expressa em livre caminho médio para a energia incidente da radiação.

Os resultados obtidos para o problema 6.4 encontram-se na tabela 6.4 para $\mu x=1$ e $\mu x=2$. Os coeficientes de atenuação e de absorção, em função da energia do Cs-137 e para o chumbo, encontram-se no apêndice desse trabalho. Os resultados de taxa de dose absorvida, em mGy/h, foram comparados com os cálculos tradicionais que empregam a equação (4.2.4) e os fatores de “buildup” foram comparados com os obtidos na literatura [5,11] e que fazem parte da tabela.

Tabela 6.4 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.4, sendo a fonte de Cs-137 e meio chumbo.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	1.86	1.34	1.28	1.28	1.45	1.05
2	0.60	1.36	0.54	1.46	1.11	0.93

Os resultados obtidos para ao fator de “buildup” concordam com os da literatura, dentro de uma faixa menor do que 10% de diferença. Para a taxa de dose absorvida, os resultados obtidos e apresentados na tabela 6.4 podem chegar a ser maior do que 45% dos valores geralmente utilizados nos cálculos de blindagem.

Problema 6.5- Simulação para fonte de Co-60 em meio espalhador heterogêneo formado por água e chumbo, chumbo e água .

Considere uma fonte pontual isotrópica de Co-60, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana

heterogênea de água e chumbo e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida e o fator de build-up de dose em função da espessura da placa expressa em livre caminho médio para a energia incidente da radiação.

Para o feixe de radiação incidente inicialmente em uma camada de água com espessura $\mu x=1$ seguida por uma camada de chumbo de espessuras $\mu x=1$, $\mu x=2$ e $\mu x=3$, os resultados encontram-se na tabela 6.5.

Tabela 6.5 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.5, com fonte radioativa de Co-60 e meio heterogêneo formado por água ($\mu x =1$) seguida de chumbo.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)*	A/C	B/D
1	2.93	2.19	2.89	1.89	1.01	1.16
2	0.97	2.12	1.05	1.86	0.92	1.14
3	0.30	2.04	0.43	2.08	0.70	0.98

* Esses valores se referem a energia de 1,0 MeV, e foram obtidos na referência [11], pois para energia de 1.25 MeV não foi encontrado na literatura, para camadas múltiplas.

Os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup”, para um meio heterogêneo, apresentados na tabela 6.5 indicam que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina simulam bem o problema proposto para , se considerarmos que a incidência inicial da radiação se faz no meio formado de água para após espalhar para o meio formado por chumbo. Na simulação numérica apresentada o pior caso ocorreu para $\mu x =3$ onde a taxa de dose absorvida corresponde a 70% do valor geralmente calculado.

Para o feixe de radiação incidente inicialmente em uma camada de chumbo com espessura $\mu x=1$ seguida por uma camada de água de espessuras $\mu x=1$, $\mu x=2$ e $\mu x=3$, os resultados encontram-se na tabela 6.6.

Tabela 6.6 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.5, com fonte radioativa de Co-60 e meio heterogêneo formado por chumbo ($\mu x =1$) seguida de água.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.) ©	B (literat.)(D)*	A/C	B/D
1	2.89	4.50	2.11	1.38	1.37	3.26
2	1.42	6.70	1.57	2.79	0.90	2.40
3	0.35	5.33	0.99	4.76	0.35	1.12

* Esses valores se referem a energia de 1,0 MeV, e foram obtidos na referência [11], pois para energia de 1.25 MeV não foi encontrado na literatura, para camadas múltiplas.

Os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup”, para um meio heterogêneo, apresentados na tabela 6.6, não são nada bons e indicam que outros efeitos devem ser considerados quando o feixe de radiação incide inicialmente no chumbo para após ser espalhado para a água. O chumbo, devido a sua alta densidade e número atômico, deve produzir efeitos outros que predominam sobre o espalhamento Compton, aqui modelado pelo núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, e que devem ser inseridos para melhorar os resultados.

Problema 6.6- Simulação para fonte de Cs-137 em meio espalhador heterogêneo formado por água e chumbo, chumbo e água .

Considere uma fonte pontual isotrópica de Cs-137, com atividade de 1 Ci situada no ar a 1 m de distância de uma blindagem constituída por uma placa plana

heterogênea de água e chumbo e cinco grupos de energia. Determine a taxa de dose absorvida e o fator de build-up de dose em função da espessura da placa expressa em livre caminho médio para a energia incidente da radiação.

Considerando que o feixe de radiação incida inicialmente em uma camada de água com espessura $\mu x=1$ seguida por uma camada de chumbo de espessuras $\mu x=1$, $\mu x=2$ e $\mu x=3$, os resultados encontram-se na tabela 6.7.

Tabela 6.7 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.6, com fonte radioativa de Cs-137 e meio heterogêneo formado por água ($\mu x =1$) seguida de chumbo.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	0.57	1.78	0.75	2.03	0.76	0.88
2	0.17	1.69	0.23	1.72	0.74	0.98
3	0.04	1.33	0.09	1.81	0.44	0.73

Os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup”, para um meio heterogêneo, apresentados na tabela 6.7 indicam que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina simulam razoavelmente o problema proposto para $\mu x =1$ e 2, se considerarmos que a incidência inicial da radiação se faz no meio formado de água para após espalhar para o meio formado por chumbo.

Para o feixe de radiação incidente inicialmente em uma camada de chumbo com espessura $\mu x=1$ seguida por uma camada de água de espessuras $\mu x=1$, $\mu x=2$ e $\mu x=3$, os resultados encontram-se na tabela 6.8.

Tabela 6.8 – Taxa de dose absorvida, em mGy/h, e fator de “build-up” obtidos com o método LTS_N , para o problema 6.6, com fonte radioativa de Cs-137 e meio heterogêneo formado por chumbo ($\mu x = 1$) seguida de água.

μx	Dose(LTS_N)(A)	B(LTS_N)(B)	Dose (tradic.)(C)	B (literat.)(D)	A/C	B/D
1	0.43	2.47	0.47	1.27	0.92	1.95
2	0.19	3.31	0.40	2.92	0.48	1.13
3	0.05	2.95	0.28	5.55	0.18	0.53

Os resultados obtidos para a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup”, para um meio heterogêneo, apresentados na tabela 6.8, não são nada bons e indicam que outros efeitos, principalmente o efeito fotoelétrico, devem ser considerados quando o feixe de radiação incide inicialmente no chumbo para após ser espalhado para a água. O chumbo, devido a sua alta densidade e número atômico, deve produzir efeitos outros que predominam sobre o espalhamento Compton, aqui modelado pelo núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, e que devem ser inseridos para melhorar os resultados.

7. CONCLUSÕES

Este trabalho teve por objetivo o uso do método LTS_N na equação de transporte de fótons para determinação da taxa de dose absorvida e do fator de “build-up” em placas planas homogêneas e heterogêneas, usando o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina. Os resultados obtidos mostram que o objetivo foi alcançado e que o método LTS_N mostrou-se eficiente para os cálculos desses parâmetros úteis em proteção radiológica. Este trabalho também mostrou que ao tratar de placas heterogêneas, dependendo do material a ser utilizado como meio absorvedor, outros efeitos devem ser considerados, além do espalhamento de Klein-Nishina.

Os resultados obtidos para as fontes de Co-60 e Cs-137, emitindo radiação gama em meios homogêneos, formados de água ou chumbo, mostraram que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, simulam bem os problemas para determinação de parâmetros de blindagem, como a taxa de dose absorvida e o fator de “buildup”. Os resultados foram obtidos para $N=6$, pois para ordens de quadratura maiores os resultados convergiram numericamente para os valores apresentados, e 5 grupos de energia. Espera-se que os resultados melhorem, à medida que aumentem os grupos em energia, o que implica em um aumento muito grande no esforço computacional.

Os resultados para meios heterogêneos formados por água e chumbo, com a radiação incidente inicialmente na água, indicam que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina simulam razoavelmente o problema de determinação da taxa de dose e do fator de “buildup”, para $\mu_x = 1$ e 2, se

considerarmos que a incidência inicial da radiação se faz no meio formado de água para após espalhar para o meio formado por chumbo. Para espessuras maiores ($\mu x = 3$), a simulação difere muito dos valores esperados.

Os resultados para meios heterogêneos formados por chumbo e água, com a radiação incidente inicialmente no meio formado por chumbo, indicam que outros efeitos devem ser considerados quando o feixe de radiação incide inicialmente no chumbo para após ser espalhado para a água. O chumbo, devido a sua alta densidade e número atômico, deve produzir efeitos outros que predominam sobre o espalhamento Compton, aqui modelado pelo núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, e que devem ser inseridos para melhorar os resultados. Acredita-se que ao modelar o problema inserindo o efeito fotoelétrico na equação de transporte, o método LTS_N poderá ser utilizado como ferramenta para obter soluções do fluxo escalar e determinação dos parâmetros de blindagens que se pretende.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BARICHELO, L. B., 1992. “**Formulação Analítica para Solução de Ordenada Discreta Unidimensional**”, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS.
2. BATISTELA, C. H. F., 1997. “**Estudo de Criticalidade pelo Método LTS_N** ”, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS.
3. BATISTELA, C. H.; VILHENA, M. T.; BORGES, V., 1997. “Criticality Calculation by the LTS_N Method”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 34, pp. 603-606.
4. BATISTELA, C. H.; VILHENA, M. T.; BORGES, V., 1996. “**Calculo do Fator de Multiplicação Efetivo pelo Método LTS_N** ”, EGATEA/UFRGS, vol. 24, pp. 101-111.
5. BLIZARD, E. P.: **Reactor Handbook**. Interscience Publishers, New York, 1962.
6. BRANCHER, J. D., 1998. “**Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenadas Discretas pelo Método LTS_N para valores de N grandes**”, Tese de Doutorado, PPGEM/UFRGS.
7. BORGES, V.; VILHENA, M. T.; CHIES, R., 1997. “ **Cálculo de Espessura de Blindagem pela Combinação dos métodos LTS_N e Decomposição**”, XI ENFIR, pp. 202-206.

8. CHIES, R. P., 1996. “**Cálculo da Espessura de Blindagem pela Combinação dos Métodos LTS_N e Decomposição**”, Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada/UFRGS.
9. DUDERSTADT, J. J. & MARTIN, W. R., **Transport Theory**. John Willey & Sons, Inc. New York, 1979
10. GONÇALVES, G. A. ; SEGATTO. C. F. ; VILHENA, M.T. the LTS_N Particular Solution in a Slab for an Arbitrary Source and Large Order of Quadrature. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**. Great Britain.
11. HIRAYAMA, H.; SHI, K.: “Application of the EGS4 Monte Carlo Code to Study of Multilayer Gamma-Ray Exposure Buildup Factors of up to 40 mfp”. **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 35, no. 11, p. 816-829, 1998.
12. SAUER, L. Z., 1997. “**Solução da Equação de Transporte Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina: Uma Aplicação ao Cálculo de Dose**”, Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada/UFRGS.
13. SEGATTO, C. F., 1995. “**Formulação LTS_N para Problemas de Transporte sem Simetria Azimutal e Problemas Dependentes do Tempo**”, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS.

14. SEGATTO, C. F.; VILHENA, M. T., 1994. "Extension of the LTS_N Formulation for Discrete Ordinates Problem Without Azimutal Symmetry", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 21, pp. 701-710.
15. SEGATTO, C. F. ; VILHENA, M.T. ; GOMES, M. G.; The One – Dimensional LTS_N Solution in a Slab with High Degree of Quadrature. In: **Annals of Nuclear Energy**, Great Britain.
16. STRANG, G. **Linear Algebra and its Applications**. HBJ, 1980.
17. STRECK, E. E., 1993. "**Solução Analítica para Aproximação P_N da Equação de Transporte Linear Unidimensional**", Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS.
18. TRINDADE, L. B.,1997. Cálculo da dose pelo método LTP_N aplicado a Equação de Boltzmann unidimensional para fótons em valores discretos de energia. Porto Alegre:PROMEC.Dissertação(Mestrado em Engenharia) – Escola de Engenharia. UFRGS.
19. VILHENA, M. T. , BARICHELO, L. B. "A new analytical approach to solve the neutron transport equation. **Kerntechnik**. v. 56, n. 5, p. 334 – 336, 1991"
20. VILHENA, M. T. E BORGES, V. B., 1995. "**O Uso dos Métodos LTS_N e Decomposição no Cálculo de Blindagens**". Simpósio sobre Integração Regional da Energia Nuclear, pg.477-481, Rio de Janeiro, Brasil.

21. VILHENA, M. T.; BARRICHELLO, L. B.; ZABADAL, J.; SEGATTO, C. F.; CARDONA, A. V., 1997. "General Solution of the One-Dimension Approximations to the Transport Equations", **Progress in Nuclear Energy**.
22. WOOD, J., Computational Methods in Reactor Shielding, **Pergamon Press**, U. K., 1982
23. ZABADAL, R. S., 1994. "**Solução da Equação Multidimensional de Transporte pelo Método LTS_N** ", Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS.
24. ZABADAL, R. S.; VILHENA, M. T.; BARRICHELLO L. B., 1995. "Solution of the Three-Dimensional One-Group Discrete Ordinates Problem by the LTS_N Method", **Annals of Nuclear Energy**, Vol. 22, pp. 131-134.
25. ZABADAL, R. S.; VILHENA, M. T.; BARRICHELLO L. B., 1997. "An Analytical Solution for the Two-Dimensional Discrete Ordinates Problem in a Convex Domain", **Progress in Nuclear Energy**, Vol. 31, pp. 225-228.

A. DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO DO TRANSPORTE

A equação do transporte é a descrição matemática da migração de partículas através de meios materiais . Uma vez que não se pode especificar a posição e velocidade de uma partícula individualmente, devido ao número colossal destas, a equação do transporte baseia-se no comportamento médio de uma população de partículas (nêutrons, fótons, ondas, íons,...).

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

1. Definições e Notações

1.1 Nêutron como uma partícula pontual

Na teoria de transporte, um nêutron é considerado como uma partícula pontual no sentido de que pode ser descrito completamente por sua posição \underline{r} e velocidade \underline{v} .

O vetor velocidade é frequentemente representado por:

$$\underline{V} = v \underline{\Omega} \tag{A.1}$$

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

1.2 Densidade angular de nêutrons ($N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$)

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

1.3 Densidade de nêutrons

Define-se densidade de nêutrons como:

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

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

1.4 Corrente angular de nêutrons ($\underline{j}(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$)

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

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

1.5 Fluxo angular de nêutrons ($\psi(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$)

É definido como produto do módulo da velocidade pela densidade angular:

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

1.6 Fluxo escalar de nêutrons ($\phi(\underline{r}, E, t)$)

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

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

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

1.7 Corrente de nêutrons ($J(\underline{r}, E, t)$)

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

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

1.8 Fontes independentes

As fontes independentes são fontes de nêutrons que não dependem da densidade de nêutrons do sistema. Elas aparecem por razões outras que não colisões (por exemplo, fissões espontâneas, ação de raios cósmicos,...) e são representadas pela quantidade $Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$, que é definida como a probabilidade, por unidade de tempo, que um nêutron de energia E apareça em \underline{r} por unidade de ângulo sólido, por unidade de energia.

1.9 Seções de choque

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

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

$\sigma_e(\underline{r}, E)$ seção de choque de espalhamento elástico

$\sigma_i(\underline{r}, E)$ seção de choque de espalhamento inelástico

$\sigma_\gamma(\underline{r}, E)$ seção de choque de captura radioativa

$\sigma_f(\underline{r}, E)$ seção de choque de fissão

Define-se seção de choque diferencial como a probabilidade de que, havendo colisões de determinado tipo (espalhamento, fissão,...) os nêutrons resultantes tenham determinadas direções e energias. A seção de choque diferencial pode ser representada por:

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

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

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

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

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

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

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

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

1.10 Taxas de interação

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

$$\int_{4\pi} v\sigma_x N d\Omega = \int_{4\pi} v\sigma_x(\underline{r}, E) N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\Omega = v\sigma_x(\underline{r}, E) \int_{4\pi} N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) d\Omega = v\sigma_x(\underline{r}, E) n(\underline{r}, E, t)$$

onde:

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

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

$$v'\sigma_x(\underline{r}, E') f_x(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t)d\Omega'dE'd\Omega dE \quad (\text{A. 11})$$

2. Derivação da Equação de Transporte de Partículas

Derivamos uma equação exata de fase-espaco-densidade $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$ que caracteriza o processo de transporte pelo simples balanceamento dos vários mecanismos pelos quais as partículas podem ser ganhadas ou perdidas em um volume arbitrário dentro de um sistema:

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

Aqueles nêutrons de energia E que sofreram uma colisão podem ser considerados como sendo perdidos do grupo enquanto permanecem os que não colidiram. A distância percorrida por um nêutron no tempo Δt é $v \Delta t$; assim, a probabilidade de que um nêutron sofra uma colisão neste tempo é:

$$\sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t \quad (\text{A. 12})$$

A probabilidade de que um nêutron não sofra uma colisão neste tempo e que permaneça é, conseqüentemente

$$1 - \sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t \quad (\text{A. 13})$$

Portanto:

$$N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)[1 - \sigma_t(\underline{r}, E)v\Delta t]dVd\underline{\Omega}dE \quad (\text{A. 14})$$

é o número de nêutrons que permanecem no grupo.

Além disso, alguns nêutrons perdidos podem retornar ao grupo devido a colisões com nêutrons de outros grupos, ou de fontes independentes. Assim:

$$\left[\int \int \sigma_t(\underline{r}, E')f(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E)v'N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t)d\underline{\Omega}'dE' \right] dVd\underline{\Omega}dE\Delta t \quad (\text{A. 15})$$

é o número de nêutrons que entram no grupo como resultado de colisões e:

$$Q(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)dVd\underline{\Omega}dE\Delta t \quad (\text{A. 16})$$

é o número de nêutrons que entram no grupo através de fontes.

Adicionando (A.14), (A.15) e (A.16) e eliminando $dVd\underline{\Omega}dE$, a densidade angular de nêutrons na posição $\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t$ no tempo $t + \Delta t$ é dado por:

$$N(\underline{r} + \underline{\Omega}v\Delta t, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t) = N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)(1 - \sigma_t v \Delta t) +$$

$$\left[\iint \sigma'_t f v' N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t) d\underline{\Omega}' dE' \right] \Delta t + Q \Delta t \quad (\text{A.17})$$

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

$$\sigma'_t f \equiv \sigma(\underline{r}, E') f(\underline{r}; \underline{\Omega}', E' \rightarrow \underline{\Omega}, E) \quad (\text{A.18})$$

e

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

Dividindo ambos os lados de (A. 17) por Δt e fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, tem-se:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(\underline{r} + \underline{\Omega} v \Delta t, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)}{\Delta t} \right] + \sigma_t v N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) = \quad (\text{A.19})$$

$$\iint \sigma'_t f v' N(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t) d\underline{\Omega}' dE' + Q$$

O primeiro termo à esquerda da equação (A.19) é a derivada total em função do tempo a densidade angular que pode ser denotado por dN/dt onde N representa $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t)$.

Se o termo $N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t + \Delta t)$ for adicionado e subtraído ao numerador do termo entre colchetes da equação (A.19), duas equações são obtidas:

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

e

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

O resultado (A. 21) é obtido tomando-se \underline{r} em coordenadas cartesianas. cujas componentes são x, y, z e $\underline{\Omega}$ com componentes $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$. O lado esquerdo da equação (A. 21) pode ser escrito como :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\frac{N(x + \Omega_x v\Delta t, y + \Omega_y v\Delta t, z + \Omega_z v\Delta t, \dots) - N(x, y, z, \dots)}{\Delta t} \right] =$$

$$v\Omega_x \frac{\partial N}{\partial x} + v\Omega_y \frac{\partial N}{\partial y} + v\Omega_z \frac{\partial N}{\partial z} = v\underline{\Omega} \cdot \nabla N(\underline{r}, \underline{\Omega}, E, t) \quad (\text{A. 22})$$

Este último termo representa v vezes a derivada direcional de N na direção de $\underline{\Omega}$.

Fazendo-se os arranjos necessários a equação (A. 19) torna-se:

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

onde:

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

$$e \quad (\text{A. 24})$$

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

A equação (A. 23) é forma básica da equação de transporte de nêutrons e pode também ser expressa em termo de fluxo angular ψ . Então, rescrevendo-a, obtém-se:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{\Omega} \cdot \nabla \psi + \sigma_t \psi = \int \int \sigma_t' f \psi' d\underline{\Omega}' dE' + Q \quad (\text{A. 25})$$

onde:

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

$$e \quad (\text{A. 26})$$

$$\psi' = v' N' \equiv \psi(\underline{r}, \underline{\Omega}', E', t)$$

B. A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MULTIGRUPO DEPENDENTE DA ENERGIA

Ao considerarmos o comportamento de fótons e não o de nêutrons, é mais conveniente nos referirmos a energia liberada pela radiação e não pelo número de partículas [25], e trabalhar com uma quantidade $I(\underline{r}, E, \underline{\Omega})$, denominada intensidade de fluxo angular de energia, relacionada com a densidade do fluxo angular de energia, através da expressão

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

Também podemos, ao invés da variável energia E , se tratando de fótons, é mais natural trabalhar com o comprimento de onda, 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

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

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

Antes de obter a equação do transporte na forma desejada, para problemas com fótons, primeiramente enunciaremos duas relações necessárias para o próximo contexto:

1. Para que possamos obter a equação (B.2) em comprimento de onda λ , notamos que as partículas devem ser conservadas [22], e escreveremos

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

onde,

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

logo escrevemos

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

isto é

$$\lambda \phi(x, \lambda, \mu) = \frac{0.511}{\lambda} \phi(x, E, \mu) \quad \text{B.6}$$

ou seja

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

Definindo temos

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

então podemos dizer que:

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

2. Pelo mesmo motivo, o núcleo de espalhamento pode ser escrito em termos de comprimento de onda como sendo:

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

ou,

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

Ou seja

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

Tomando a equação (B.2), e multiplicando ambos os membros por E, e usando a equação (B.9), obtem-se:

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

Usando a equação (B.10), pode-se rescrever a equação (B.13), como sendo:

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

onde usamos

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

e

$$\hat{\sum} (\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) = \frac{\lambda}{\lambda^2} \sum (\lambda' \rightarrow \lambda; \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) \quad \text{B.16}$$

C. TABELAS DOS COEFICIENTES DE ABSORÇÃO E ATENUAÇÃO:

Neste apêndice são apresentados os valores dos coeficientes de atenuação (μ_T) e absorção (μ_a) da água e do chumbo para as energias de interesse neste trabalho. Estes coeficientes foram obtidos por interpolação através de uma Spline Cúbica usando o software Matlab – The Math Works. Também é apresentada uma tabela com os valores da constante α para água e chumbo.

Tabela C.1 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 1,25 MeV.

E_i (MeV)	$(\mu_T)_{H_2O}[cm^{-1}]$	$(\mu_a)_{H_2O}[cm^2/g]$	$(\mu_T)_{Pb}[cm^{-1}]$	$(\mu_a)_{Pb}[cm^2/g]$
1.25	0.0633	0.0295	0.6787	0.0325
0.5623	0.0920	0.0330	1.3999	0.0749
0.3627	0.1106	0.0326	2.7830	0.1652
0.2677	0.1238	0.0312	5.3526	0.3117
0.2121	0.1334	0.0300	8.9687	0.5119

Tabela C.2 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 0,66 MeV.

E_i (MeV)	$(\mu_T)_{H_2O}[cm^{-1}]$	$(\mu_a)_{H_2O}[cm^2/g]$	$(\mu_T)_{Pb}[cm^{-1}]$	$(\mu_a)_{Pb}[cm^2/g]$
0.66	0.0856	0.0328	1.2070	0.0622
0.4011	0.1059	0.0329	2.3322	0.1340
0.2880	0.1207	0.0319	4.4053	0.2609
0.2247	0.1310	0.0306	8.0479	0.4599
0.1842	0.1384	0.0292	10.6932	0.6062

Tabela C.3 Dados obtidos para água e chumbo para o cálculo da constante α .

Meio	$\rho(\text{g/cm}^3)$	A	Z	$\alpha(\text{cm}^{-1})$
ÁGUA	1.00	18	7.42	0.1651
Chumbo	11.5	207.21	82	1.8232

Tabela C.4 Fatores de peso de radiação.

Tipos e faixas de Energia		W_R
Fótons, todas as energias		1
Elétrons e muons, todas as energias		1
Nêutrons, energia	< 10 KeV	5
	10 KeV a 100 KeV	10
	> 100 KeV a 2 MeV	20
	> 2 MeV a 20 MeV	10
	> 20 MeV	5
Prótons, energia	> 2 MeV	5
Partícula alfa, fragmentos de fissão e Núcleos pesados		20

Tabela C.5 Fatores de peso de tecido.

Tecido ou órgão	W_T
Gônadas	0.20
Medula Óssea	0.12
Cólon	0.12
Pulmão	0.12
Estômago	0.12
Bexiga	0.05
Mama	0.05
Fígado	0.05
Esôfago	0.05
Tireóide	0.05
Pele	0.01
Superfície Óssea	0.01
Restante*	0.05

* Para fins de cálculo, o restante é composto por: glândulas supra-renais, cérebro, intestino grosso, intestino delgado, rins, Pâncreas, baço, timo e útero.