

RECYT

Año 18 / Nº 26 / 2016 / 26–33

Simulación de deposición de energía de los fotones y electrones utilizando la ecuación de Boltzmann

Simulation of energy deposition by photons and electrons using the Boltzmann equation

Simulação da deposição de energia por fótons e elétrons utilizando a equação de Boltzmann

Volnei Borges¹, Jorge R. Zabadal¹, Vinicius G. Ribeiro^{2,3,*}

1- Universidad Federal del Rio Grande do Sul, Departamento de Ingeniería Mecánica - Grupo de Estudios Nucleares, Av. Osvaldo Aranha, 99 – 4º andar – Porto Alegre, RS, Brazil.

2- Centro Universitário Ritter dos Reis, Facultad de Informática, Rua Orfanotrófio, 555 – Porto Alegre, RS, Brazil.

3- Escola Superior de Propaganda e Marketing, Rua Guilherme Schell, 350 - Porto Alegre, RS, Brazil.

*E-mail:vinicius.ribeiro@espm.br

Resumen

Los procedimientos que implican el uso de radiación ionizante en el campo biomédico se han investigado en los últimos años - en particular con respecto a la determinación de la energía depositada en el tejido humano en pacientes sometidos a radiación. En este contexto, el presente trabajo se presenta una metodología para el cálculo de la dosis absorbida, el factor de acumulación y la energía depositada en los materiales utilizados para simular el tejido humano y otras pantallas utilizadas en los proyectos. Los procesos aleatorios de interacción de fotones y electrones con estos materiales se simularon mediante métodos matemáticos para la solución de la ecuación de transporte con aproximaciones de los núcleos dispersión de Klein-Nishina y Rutherford aplicado a la ecuación de Fokker-Planck.

Palabras clave: Dosis Absorbida; Energía Depositada; Ecuación De Transporte; Klein- Nishina; Fokker - Planck.

Abstract

Procedures involving the use of ionizing radiation in the biomedical field has been investigated in recent years - in particular as regards the determination of the energy deposited in human tissue in patients undergoing radiation. In this context, this paper presents a methodology for the calculation of the absorbed dose, the build-up factor and the energy deposited in the materials used to simulate human tissue and other screens used in projects. The random processes of interaction of photons and electrons with these materials were simulated by mathematical methods for solving to solve the transport equation with approximations of the scattering kernel of Klein-Nishina and Rutherford scattering cores applied to the Fokker-Planck equation.

Keywords: Absorbed Dose; Deposited Energy; Transport Equation, Klein-Nishina; Fokker -Planck.

Resumo

Procedimentos que envolvem o uso das radiações ionizantes na área biomédica têm sido investigados nos últimos anos – em especial, no que tange à determinação da energia depositada no tecido humano em pacientes submetidos à radiação. Nesse contexto, o presente trabalho apresenta uma metodologia para cálculo da dose absorvida, fator de build-up e energia depositada em materiais empregados para simular o tecido humano e outros utilizados em projetos de blindagens. Os processos randômicos de interação de fótons e elétrons com esses materiais foram simulados por métodos matemáticos para resolver a equação de transporte com aproximações dos núcleos de espalhamento de Klein-Nishina e Rutherford aplicada na equação de Fokker-Planck.

Palavras-chave: Dose Absorvida; Energia Depositada; Equação De Transporte; Klein-Nishina; Fokker-Planck.

Introdução

As atividades que envolvem o uso das radiações ionizantes na área biomédica têm evoluído nos últimos anos. Procedimentos foram revistos, com o propósito de minimizar os níveis de radiações nos ambientes onde atuam profissionais, pacientes e o público em geral. Novas metodologias de projetos de blindagens e recomendações quanto à dose na entrada da pele em pacientes submetidos a exames radiológicos foram publicadas. Procedimentos para determinação da energia depositada no tecido humano em pacientes submetidos à radiação estão sendo pesquisados.

As radiações ionizantes e seus processos de interação com meios materiais são de interesse em diversas áreas do conhecimento, pois são utilizadas tanto em pesquisas como em diagnóstico e terapias. Entre elas as mais importantes são as radiações X, gama e feixe de elétrons produzidos em aceleradores de partículas.

As radiações X e gama possuem grande poder de penetração em meios materiais, e quando interagem com o tecido humano apresentam potencial de risco externo considerado grave, mesmo a fonte estando fora do organismo. Já os elétrons apresentam potencial de risco interno e externo relativo, considerado moderado. O risco interno ocorre devido à possibilidade de contaminação por incorporação do material no corpo humano, seja por ingestão, inalação ou outra via de penetração do material no organismo. O grande poder de penetração dos raios X e gama ocorrem devido à ausência de massa de repouso e carga elétrica, além de seu comportamento ondulatório. Esse poder de penetração, antes de sofrerem a primeira interação, depende da probabilidade de ocorrência dos diferentes tipos de eventos que podem resultar na absorção ou no espalhamento da radiação incidente no meio. Essas probabilidades são determinadas pelas seções de choque que são funções da energia da radiação e do meio material e que determinam as possibilidades de deposição de energia no meio.

Os elétrons, ao interagirem com um meio material, transferem energia por meio de processos que envolvem colisões e freamento, perdendo energia ao longo de sua trajetória. Essa energia perdida pode ser depositada nas imediações da trajetória ou esses elétrons podem gerar fótons de freamento, cuja energia pode ser absorvida longe da trajetória do elétron incidente.

Dessa forma, tanto fótons X e gama como elétrons apresentam probabilidades de deposição de energia que pode ser transferida e absorvida pelo meio onde incidem, podendo provocar algum tipo de dano, principalmente se o meio em questão for tecido biológico.

Para determinar a energia total depositada pela radiação no meio material, é importante conhecer não somente a energia de cada tipo de radiação, mas também o fluxo de fótons ou partículas presentes nos pontos considerados.

Em termos práticos, a importância da determinação

desses fatores, em proteção radiológica, permitem projetos tanto uma sala de raios X diagnóstico, como de instalações de medicina nuclear, radioterapia ou mesmo de irradiador de alimentos, entre outros. O uso da equação de transporte de Boltzmann [1] aplicada a fótons e partículas carregadas constitui-se na ferramenta básica para o estudo quantitativo dos diversos fenômenos físicos associados às radiações ionizantes, possibilitando o cálculo e análise de blindagens e a determinação da dose de radiação recebida por indivíduos ocupacionalmente expostos e por pacientes.

A solução da equação de transporte fornece parâmetros para o cálculo da dose absorvida, fator de *build-up* e energia depositada em materiais empregados para simular o tecido humano e outros utilizados em projetos de blindagens.

A Física associada ao processo de interação da radiação com a matéria é descrita por essa equação que apresenta sete dimensões do espaço de fase, sendo três espaciais, três componentes do momento e uma temporal. A complexidade do conjunto de equações que modelam os processos de interação, assim como o grande esforço computacional associado com a abordagem probabilística, através do método Monte Carlo, justifica a necessidade de que sejam adotados métodos determinísticos para a solução do problema.

A solução da equação de transporte, de forma exata, somente é possível para casos muito simples, mesmo fazendo uso de técnicas numéricas. Desse modo, diversos métodos de solução dessa equação foram desenvolvidos, incluindo entre eles formulações de modelos aproximados para representar a equação de transporte, para os quais se buscam soluções exatas. Nesse tipo de abordagem, um dos métodos mais utilizado é o das ordenadas discretas (S_N), em que a equação de transporte é calculada sobre um conjunto de direções discretas, sendo associado um peso para cada uma dessas direções. O conjunto de equações algébricas resultante dessa abordagem pode ser resolvido por procedimentos de recorrência e iterações, ou uma solução analítica pode ser obtida através do método LTS_N [2,3,4,5,6,7,8,9,10,11], que pode fazer uso do núcleo de espalhamento de Klein-Nishina [12] e também utilizar a aproximação LTP_N [13]. Problemas tridimensionais podem ser tratados com esse método [14].

Nesse trabalho, serão apresentados os resultados obtidos para o fator de “*build-up*” e a dose absorvida, para fontes pontuais isotrópicas, na aplicação do método LTS_N para solução da equação de transporte de fótons, com núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, para valores discretos de energia considerando placas heterogêneas formadas por duas regiões compostas por diferentes materiais, pois interessa ao projetista as espessuras de placas necessárias para atenuar o feixe de radiação a valores que atendam as normas existentes. Simulações foram realizadas considerando a energia do fóton de 1,0 MeV incidindo nos materiais compostos por água e por água e chumbo.

Também serão mostrados os resultados obtidos para a energia absorvida, aplicando o método em placas homogêneas, duas dimensões, em meios materiais como água, tecido leve (ICRU44, 1989) [15] e osso (ICRU44,1989) [15] com energia do fóton incidente de 1,25 MeV, pois, no caso do estudo de danos em tecidos biológicos provocados por deposição de energias oriundas das radiações ionizantes, o pesquisador necessita da energia absorvida em materiais que simulem esses tecidos. No método de solução da equação de transporte, para obter o fluxo de fótons foi utilizado o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e na descrição dos elétrons foi utilizada a aproximação de Fokker-Planck com espalhamento de Rutherford.

Metodologia

A metodologia de cálculo aqui apresentada de forma simples parte da equação de transporte de fótons unidimensional e estacionária, sendo estendida para problemas bidimensionais para fótons e elétrons.

Para determinar o fator de *build-up* de exposição em pontos de interesse nas placas de blindagens, o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina é inserido na equação de transporte de fótons, o termo integral relativo à dependência energética é discretizado, resultando em um sistema de equações para os fluxos angulares em valores discretos em energia. Esse sistema é resolvido aplicando o método LTS_N. De um modo geral, a metodologia consiste em aproximar o termo integral aplicando-se a Regra de Simpson, a variável espacial (x) é tratada usando-se a Transformada de Laplace, na variável angular (μ) os Polinômios de Legendre e o termo em energia, que pode ser escrito em termos do comprimento de onda, é tratado usando a Regra de Simpson.

Essa metodologia pode ser aplicada em problemas unidimensionais e bidimensionais. Para simplicidade de cálculos, inicialmente considere geometria plana, unidimensional ou de placa, com simetria azimutal, a equação de transporte estacionária sem fonte externa, meio não multiplicador, com o núcleo de espalhamento aproximado por uma série finita em termos de polinômios de Legendre e relacionado com a seção de choque de Klein-Nishina, para o espalhamento Compton, para cada região de uma placa heterogênea, a equação toma a seguinte forma [16]:

$$\mu \frac{\partial I^r(x, \lambda, \mu)}{\partial x} + \sigma'_i(\lambda) I^r(x, \lambda, \mu) = \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{2} \int_{\lambda_0}^{\lambda_0+2} \alpha K(\lambda', \lambda) P_\ell(1 + \lambda' - \lambda) P_\ell(\mu) \int_{-1}^{+1} P_\ell(\mu') I^r(x, \lambda', \mu') d\mu' d\lambda' \quad (1)$$

onde $0 < x < (x_r - x_{r-1})$, r indica a região, $r=1:R$; $I^r(x, \lambda, \mu)$

representa o vetor fluxo angular em energia que é conhecido nas fronteiras da placa, $\sigma'_i(\lambda)$ representa a seção de choque total, $K(\lambda'\lambda)$ o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e $P_\ell(\mu)$ polinômios de Legendre. A integral em λ , é calculada desde o limite máximo de energia ($\lambda_0\lambda$) para o fóton até o limite mínimo de energia ($\lambda_0 + 2$).

Aplicando a Regra de Simpson na Equação (1), resulta:

$$\mu_n \frac{\partial I^r_{jn}(x)}{\partial x} + \sigma^r_{tj} I^r_{jn}(x) = \frac{\Delta}{3} \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{g=1}^M c_g \alpha K_{gj} P_\ell(1 + \lambda_g - \lambda_j) P_\ell(\mu_n) \sum_{k=1}^N \omega_k P_\ell(\mu_k) I^r_{gk}(x) \quad (2)$$

Onde ω_k são os pesos da quadratura de Gauss.

O método LTS_N consiste na aplicação da transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias geradas pela aproximação S_N, representada pelas equações (1) e (2), resultando em um sistema de equações algébricas simbólicas, dependentes de “s”. Após a solução analítica deste sistema, aplica-se a inversa da transformada de Laplace. Para tal, considera-se a Equação (2), aplicando a Transformada de Laplace, na variável x, resulta no seguinte sistema de equações algébricas para cada região:

$$s \bar{I}_{jn}(s) + \frac{\sigma_{tj}}{\mu_n} \bar{I}_{jn}(s) - \frac{\Delta}{3\mu_n} \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{g=1}^M c_g \alpha K_{gj} P_\ell(1 + \lambda_g - \lambda_j) P_\ell(\mu_n) \sum_{k=1}^N \omega_k P_\ell(\mu_k) \bar{I}_{gk}(s) = I_{jn}(0) \quad (3)$$

onde $j = 1, 2, \dots, M$ e $n = 1, 2, \dots, N$. Devido à característica do núcleo de espalhamento, $K_{gj} = 0$ se $g > j$, a Equação (3) 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, da seguinte forma:

$$A_j(s) \bar{I}_{jn}(s) = \bar{I}_{jn}(0) + \bar{Z}_{j-1}(s) \quad (4)$$

onde $A_j(s)$ é uma matriz de ordem (N x N), cujos elementos, para cada valor de energia j, tem a forma

$$a_{pq} = \begin{cases} s + \frac{\sigma_{tj}}{\mu_p} - \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_\ell(\mu_p) P_\ell(\mu_p) w_q & \text{se } p = q \\ -\frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} c_j \alpha K_{jj} P_\ell(\mu_p) P_\ell(\mu_q) w_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (5)$$

Além disso

$$\bar{I}_{jn}(s) = [\bar{I}_{j1}(s) \dots \bar{I}_{jN}(s)]^T \quad (6)$$

$$\bar{I}_{jn}(0) = [\bar{I}_{j1}(0) \dots \bar{I}_{jN}(0)]^T \quad (7)$$

$$\bar{Z}_{j-1}(s) = \sum_{i=1}^{j-1} H_i \bar{I}_i(s) \quad (8)$$

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 representados pela Equação (9).

$$h_{pq} = \begin{cases} \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_\ell(1+\lambda_i - \lambda_j) P_\ell(\mu_p) \cdot P_\ell(\mu_p) w_q & \text{se } p = q \\ \frac{\Delta}{3\mu_p} \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} c_i \alpha K_{ij} P_\ell(1+\lambda_i - \lambda_j) P_\ell(\mu_p) \cdot P_\ell(\mu_q) w_q & \text{se } p \neq q \end{cases} \quad (9)$$

Desse modo, a solução do sistema representado pela Equação (4), é escrita como:

$$\bar{I}_{jn}(s) = A_j^{-1}(s) \bar{I}_{jn}(0) + A_j^{-1}(s) \bar{Z}_{j-1}(s) \quad (10)$$

sendo obtida de forma recursiva.

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace na Equação (10) obtém-se o fluxo angular de energia, em função de x , para a energia j , na direção n , ou seja,

$$I_{jn}(x) = L^{-1}\{A_j^{-1}(s) \bar{I}_{jn}(0)\} + L^{-1}\{A_j^{-1}(s) \bar{Z}_{j-1}(s)\} \quad (11)$$

Ao inverter analiticamente a matriz $A_j(s)$ e com a posterior aplicação da técnica de expansão de Heaviside, utilizando propriedade da convolução, obtém-se uma solução analítica para a variável espacial do fluxo angular. Este procedimento resulta na seguinte expressão para o fluxo angular em energia:

$$I_{jn}(x) = \sum_{k=1}^N \beta_k e^{s_k x} + Z_{j-1}(x) * L^{-1}\{A_j^{-1}(s)\} \quad (12)$$

Onde o asterisco designa convolução e

$$\beta_k = \left[\frac{s_k^{N-1} P_{N-1} + s_k^{N-2} P_{N-2} + \dots + s_k P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_N(s)]_{s=s_k}} \right] I_{jn}(0) \quad (13)$$

e

$$Z_{j-1}(x) = H_i I_{j-1,n}(x) \quad (14)$$

Os elementos da matriz H_i são dados pela Equação (9).

Obtido o fluxo angular em energia, dado pela equação (12), o fluxo escalar em energia, para a r -ésima região da placa, pode ser expresso por:

$$\phi_i(x, \lambda_i) = \int_{-1}^1 I(x, \lambda_i, \mu) d\mu \quad (15)$$

Nesta metodologia a taxa total de dose absorvida, considerando o efeito fotoelétrico e a energia resultante

do espalhamento Compton, que foi aproximada por Klein-Nishina, é dada por:

$$D'_T = \sum_{i=0}^G \mu_{ai} \phi_i(x, E_i) E_i \quad (16)$$

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

E_i representa cada energia dos fótons.

Considerando somente a energia do feixe primário incidente, desprezando o espalhamento, a taxa de dose absorvida resulta em:

$$D'_0 = \mu_a \phi(x, E_0) E_0 \quad (17)$$

Para verificar se a aplicação dessa metodologia produz resultados satisfatórios, quando comparados com os resultados clássicos de cálculo, adota-se a seguinte equação clássica:

$$D' = D'_{inc} e^{-\mu x} B(\mu x) \quad (18)$$

onde

D' é a dose devido à exposição a uma fonte pontual isotrópica, em boa geometria,

D'_{inc} é a dose incidente na placa,

$\mu \cdot x$ representa o livre caminho médio, sendo função da energia da radiação incidente e

$B(\mu x)$ o fator de *build-up* obtido de tabelas clássicas, para meios homogêneos ou heterogêneos.

O fator de *build-up* representa um termo de correção utilizado em projetos de blindagens, 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, aqui definido como a soma do produto do coeficiente de atenuação do ar pelo fluxo escalar para todos os fótons, incluindo o fluxo incidente, dividido pelo produto do coeficiente de atenuação do ar para a energia do fluxo incidente pelo fluxo escalar incidente na placa.

Resultados e Discussão

Para verificar a funcionalidade do método proposto, quando aplicado em placa homogênea, considere uma fonte pontual isotrópica que emite fótons com energia de 1,0 MeV que incidem em uma blindagem constituída por uma placa plana homogênea de água ($\sigma_t = 0,0707 \text{ cm}^2/\text{g}$ [17]) de espessura finita. A relação da taxa de dose absorvida pela dose incidente e o fator de *build-up* foram determinados, em função da espessura da placa, expresso em termos do livre caminho médio (μx), para a energia incidente da radiação. Os resultados obtidos, considerando 5 grupos em energia e aproximação para $N=6$, encontram-se na Tabela

1. Os valores obtidos para o percentual da taxa de dose transmitida foram comparados com os cálculos tradicionais e os fatores de *build-up* foram comparados com os obtidos na literatura [17] e que fazem parte da tabela 1.

Tabela 1: Percentual da taxa de dose transmitida e fator de build-up de exposição obtidos com o método LTS_6 para meio homogêneo constituído de água.

μx	Percentual da taxa de Dose transmitida (LTS_N) A	B(LTS_N) B	Percentual da taxa de Dose transmitida (trad.) C	B[17] D	A/C	B/D
1	84%	1,95	76%	2,10	1,11	0,93
2	39%	3,19	47%	3,67	0,83	0,87

Comparando os resultados obtidos para a taxa de dose transmitida entre o método LTS_N e a metodologia de cálculo tradicional, verifica-se que o método LTS_N - juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina -, simula satisfatoriamente o problema proposto: no método tradicional, o fator de *build-up* que corrige a taxa de dose transmitida deve ser obtido em tabelas específicas, ao passo que a metodologia proposta fornece diretamente o valor da taxa de dose transmitida sem termos de correção. Esses resultados podem ser melhorados, ou seja, se aproximarem mais do valor tradicional, se forem considerados mais termos em energia – visto que os cálculos foram feitos com cinco termos em energia, empregando a a regra de Simpson. Quanto ao fator de *build-up*, os resultados obtidos pelo método LTS_N também reproduzem satisfatoriamente os publicados na literatura.

Para verificar a funcionalidade do método proposto, quando aplicado em placas heterogêneas, formadas por diferentes materiais, considera-se uma fonte pontual isotrópica que emite fótons com energia de 1,0 MeV que incidem em uma blindagem constituída por uma placa plana heterogênea formada de uma camada de água ($\sigma=0,0707 \text{ cm}^2/\text{g}$ [17]), com espessura $\mu x=1$ livre caminho médio, seguida de espessuras variadas de chumbo ($\sigma=0,06848 \text{ cm}^2/\text{g}$ [17]). A relação da taxa de dose absorvida pela dose incidente e o fator de *build-up* foram determinados, em função da espessura da placa de chumbo, mantendo fixa a de água. Os resultados obtidos, considerando 5 grupos em energia e aproximação para $N=6$, encontram-se na Tabela 2. Os valores obtidos para o percentual da taxa de dose transmitida foram comparados com os cálculos tradicionais e os fatores de *build-up* foram comparados com os obtidos na literatura [18] e que fazem parte da tabela 2.

Tabela 2: Percentual da taxa de dose transmitida e fator de build-up obtidos com o método LTS_N , para meio heterogêneo formado por água seguida de chumbo (Pb).

μx	Percentual da taxa de Dose transmitida (LTS_N) A	B(LTS_N) Água 1 mfp + Pb B	Percentual da taxa de Dose transmitida (trad.) C	B[18] Água1 mfp + Pb D	A/C	B/D
1	32%	2,19	26%	1,89	1,23	1,16
2	11%	2,12	9%	1,86	1,22	1,14
3	3%	2,04	4%	2,08	0,75	0,98

Comparando os resultados obtidos para a taxa de dose transmitida, usando o método LTS_N , com a metodologia de cálculo tradicional, verifica-se que o método LTS_N , juntamente com o núcleo de espalhamento de Klein-Nishina, simula satisfatoriamente o problema proposto, ressaltado o fato de que a metodologia proposta fornece diretamente o valor da taxa de dose transmitida sem termos de correção.

Verificada a possibilidade de utilizar a metodologia LTS_N para obter grandezas de interesse em física médica, o método foi aperfeiçoado visando obter soluções de características analíticas em problemas matemáticos onde se utilizam processos randômicos para simular as interações de fótons e elétrons com a matéria.

Foi constatado que o uso dessa metodologia para problemas de grande penetração no meio - ou seja, grandes espessuras de placas - provocavam problemas de overflow originados na exponencial com argumento positivo para grandes valores de N. Esse problema foi resolvido, trocando-se a variável dos argumentos relativos às raízes s_k positivas da equação (12), mediante uma operação de mudança de base [19]. O método foi ampliado para problemas bidimensionais e a generalização da solução LTS_N nodal para geometria retangular heterogênea, assumindo núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e modelo multigrupo em energia, foi implementada de maneira análoga ao problema unidimensional [20].

A utilização do método em problemas unidimensionais de grande penetração foi aplicada em multirregiões constituída por diferentes materiais de blindagens e as simulações numéricas para o fator de *build-up* foram comparados com os resultados do código EGS4 [17].

As simulações numéricas com o método LTS_N , para o fator de *build-up*, encontram-se na tabela 3, juntamente com os resultados obtidos com o código EGS4. As simulações foram feitas para uma placa heterogênea com duas regiões, compostas de água ($\sigma=0,0707 \text{ cm}^2/\text{g}$) e chumbo ($\sigma=0,06848 \text{ cm}^2/\text{g}$), água e ferro ($\sigma=0,0596 \text{ cm}^2/\text{g}$) e chumbo e ferro, para profundidades em múltiplos do livre caminho médio, variando de 4 mfp a 40 mfp.

Tabela 3: Fator de build-up em barreiras formadas por múltiplas camadas, para radiação gama para fonte pontual isotrópica de 1,0 MeV (Chumbo – Pb e Ferro – Fe).

μx	LTS_{16} Água 1 mfp + Pb	EGS ₄ Água 1 mfp + Pb	LTS_{16} Água 1 mfp + Fe	EGS ₄ Água 1 mfp + Fe	LTS_{16} Pb 1 mfp + Fe	EGS ₄ Pb 1 mfp + Fe
4	2,30	2,31	4,99	5,01	4,87	4,86
5	2,55	2,57	6,21	6,23	6,34	6,28
10	3,57	3,59	13,9	13,9	15,4	15,3
20	5,29	5,31	36,3	36,3	41,5	41,4
30	6,77	6,79	67,6	67,5	78,4	78,3
40	8,26	8,27	101,0	101,0	118,0	117,0

Analisando os resultados apresentados na tabela 3, verifica-se adequação dos resultados obtidos pelo método LTS_{16} , quando comparados com os do EGS4.

Salienta-se que a solução LTS_N utiliza a equação de

transporte de fótons, considera o espalhamento Compton aproximado pela seção de choque de Klein-Nishina aplicada a elétrons livres e utiliza a seção de choque total, dependente da energia, para o meio material.

Verificada a possibilidade de utilizar a metodologia LTS_N a problemas que envolvem grandes espessuras de blindagens, o passo seguinte foi ampliar o método para obter soluções de problemas bidimensionais para fótons, de modo a obter outras grandezas de interesse para projetistas, de modo a otimizar blindagens. A generalização da solução LTS_N nodal para geometria retangular heterogênea, assumindo núcleo de espalhamento de Klein-Nishina e modelo multigrupo em energia, foi implementada de maneira análoga ao problema unidimensional e encontra-se em [20].

Para soluções de problemas bidimensionais para fótons foi aplicado o método LTSN nodal na equação de transporte, de forma a obter a energia absorvida em meios retangulares homogêneos, compostos de água na forma líquida ($Z/A = 0.55508$, $\rho = 1 \text{ g/cm}^3$), tecido mole (ICRU44, $Z/A = 0.54996$, $\rho = 1.06 \text{ g/cm}^3$) e osso cortical (ICRU44, $Z/A = 0.51478$, $\rho = 1.92 \text{ g/cm}^3$). Para tal, considere um feixe de fótons monoenergético de 1,25 MeV e monodirecional incidindo no eixo de um retângulo. O fóton incidente percorre o meio depositando sua energia ou escapa dele. Nesse problema considerou-se somente a energia absorvida no meio devido aos fótons. Não foi considerada a energia depositada pelos elétrons secundários gerados pelo efeito Compton bem como outros efeitos que apresentam pequenas contribuições na deposição de energia.

As simulações numéricas obtidas com o método proposto, para determinar a energia absorvida, devido a fótons, em diferentes meios retangulares, com dimensões 20 cm x 10 cm, 20 cm x 20 cm e 30 cm x 40 cm, foram comparadas com os resultados obtidos com o código Geant 4 v8 [21] e encontram-se nas tabelas 4, 5 e 6.

Tabela 4: Energia depositada pelos fótons no meio homogêneo composto de água líquida.

Dimensões do meio homogêneo composto de água líquida (cm ²)	LTS_g	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.00309	0.00315	1.9
20 x 20	0.00457	0.00468	2.4
30 x 40	0.01140	0.01160	1.7

Tabela 5: Energia depositada pelos fótons no meio homogêneo composto de tecido mole (ICRU44).

Dimensões do meio homogêneo composto de tecido mole (cm ²)	LTS_g	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.00307	0.00313	1.9
20 x 20	0.00531	0.00542	2.0
30 x 40	0.01523	0.01560	2.4

Tabela 6: Energia depositada pelos fótons no meio homogêneo composto de osso cortical (ICRU44).

Dimensões do meio homogêneo composto de osso cortical (cm ²)	LTS_g	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.05588	0.05781	3.3
20 x 20	0.09087	0.09487	4.2
30 x 40	0.15771	0.16375	3.7

Os resultados apresentados nas tabelas 4, 5 e 6 sugerem a adequação dos métodos, mesmo sendo dois métodos diferentes para simular a deposição de energia no meio (ou seja, o método de Monte Carlo no Geant4 e o método LTSN nodal). Os resultados apresentam uma diferença máxima de 4,2% - justamente no meio mais denso, o que sugere que, à medida em que aumenta a densidade do material, cresce o número de interações e a possibilidade de outros processo de deposição de energia estejam envolvidos (em especial, o envolvimento de elétrons secundários gerados por efeito Compton), indicando uma boa concordância.

Dessa forma, o método LTSN nodal, que tratava somente de interações de fótons, foi estendido, de modo a considerar a energia depositada no meio pelos elétrons secundários gerados por espalhamento Compton. Para esse propósito foi utilizada a equação de Fokker-Planck, uma abordagem alternativa para tratar a equação de transporte para elétrons. A solução foi construída aplicando à aproximação PN na variável angular e a transformada de Laplace na variável x , obtendo-se uma equação diferencial linear de primeira ordem para a variável y , sendo esta de simples solução. A seção de choque diferencial de espalhamento foi tratada pelo espalhamento de Rutherford. Detalhes matemáticas podem ser obtidos nas referências Bodmann et alii [20] e Rodrigues et alii [22].

Para verificar a validade dessa metodologia na solução de problemas bidimensionais para elétrons, o método foi empregado para simular a energia absorvida em meios retangulares homogêneos, compostos dos mesmos materiais utilizados nas simulações para fótons, ou seja, água na forma líquida ($Z/A = 0.55508$, $\rho = 1 \text{ g/cm}^3$), tecido mole (ICRU44, $Z/A = 0.54996$, $\rho = 1.06 \text{ g/cm}^3$) e osso cortical (ICRU44, $Z/A = 0.51478$, $\rho = 1.92 \text{ g/cm}^3$). Foram considerados os elétrons produzidos no efeito Compton pela interação de um feixe de fótons monoenergético ($E = 1,25 \text{ MeV}$) e monodirecional incidentes na borda de um retângulo homogêneo de dimensões variadas e composto por diferentes materiais.

As simulações numéricas obtidas com o metodologia proposta, para determinar a energia absorvida, devido a elétrons, em diferentes meios retangulares, com dimensões 20 cm x 10 cm, 20 cm x 20 cm e 30 cm x 40 cm, foram comparadas com os resultados obtidos com o código Geant 4 v8 [24] e encontram-se nas tabelas 7, 8 e 9.

Tabela 7: Energia depositada pelos elétrons (produzidos pelo efeito Compton) no meio homogêneo composto de água líquida.

Dimensões do meio homogêneo composto de água líquida (cm ²)	P ₉	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.01845	0.01971	6.4
20 x 20	0.03379	0.03609	6.4
30 x 40	0.04581	0.04893	6.4

Tabela 8: Energia depositada pelos elétrons (produzidos pelo efeito Compton) no meio homogêneo composto de tecido mole.

Dimensões do meio homogêneo composto de tecido mole (cm ²)	P ₉	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.02288	0.02440	6.2
20 x 20	0.03317	0.03542	6.4
30 x 40	0.04952	0.05289	6.4

Tabela 9: Energia depositada pelos elétrons (produzidos pelo efeito Compton) no meio homogêneo composto de osso cortical.

Dimensões do meio homogêneo composto de osso cortical (cm ²)	P ₉	Geant4	Diferença (%)
20 x 10	0.83790	0.91244	8.2
20 x 20	0.79284	0.86380	8.3
30 x 40	0.89218	0.97249	8.3

Analisando os resultados apresentados nas tabelas 7, 8 e 9, verifica-se uma boa concordância entre a metodologia apresentada e os resultados do uso da técnica de Monte Carlo do código Geant4. A diferença máxima observada foi de 8,3% para materiais mais densos, o que sugere que outros efeitos devem ser modelados na metodologia apresentada, com o propósito de refinar esses resultados.

Para comparar os resultados da energia total absorvida (fótons e elétrons secundários) pelos meios materiais utilizados nas simulações numéricas, obtidos com a metodologia apresentada (LTS8 e P9) e com códigos que utilizam processos randômicos foi construída a tabela 10.

Tabela 10: Energia total depositada pelos fótons e pelos elétrons (produzidos pelo efeito Compton) no meio homogêneo composto de diferentes materiais.

Materiais e Dimensões do meio (cm ²)	P ₉	Geant4	Diferença (%)
Água líquida			
20 x 10	0,02154	0,02286	5,8
20 x 20	0,03836	0,04077	5,9
30 x 40	0,05721	0,06053	5,5
Tecido mole			
20 x 10	0,02595	0,02753	5,7
20 x 20	0,03848	0,04084	5,8
30 x 40	0,06475	0,06849	5,5
Osso cortical			
20 x 10	0,89378	0,97025	7,9
20 x 20	0,88371	0,95867	7,8
30 x 40	1,04989	1,13624	7,6

Na tabela 10, apresentamos os resultados obtidos para a energia total absorvida em diferentes meios materiais que simulam tecidos biológicos, devido a fótons incidentes no meio que depositam energia do fóton espalhado, bem como gerando elétrons secundários produzidos pelo efeito Compton. As simulações numéricas foram realizadas com a metodologia apresentada, onde foram utilizadas as aproximações LTS8 e P9 com núcleos de espalhamento

de Klein-Nishina e Rutherford, e com o código Geant4 que utiliza a técnica de Monte Carlo. A diferença absoluta máxima encontrada foi menor do que 8%, indicando uma boa concordância entre essa metodologia e a técnica de Monte Carlo.

Convém salientar que a convergência numérica dos resultados apresentados pelo método LTSN mostram que se aumentarmos de N=14 para N=16 os resultados apresentam coincidência de seis algarismos significativos, nas simulações de multiregiões unidimensionais para cálculos do fator de *build-up*. Nos problemas bidimensionais para fótons e elétrons, a metodologia LTSN foi aplicada para N=8 na equação de transporte para simular as interações dos fótons e a aproximação PN para N=9 na variável angular da equação de Fokker-Planck para as simulações de elétrons.

O tempo de processamento requerido pelas formulações LTSN é consideravelmente inferior ao demandado pelo sistema Geant4. Entretanto, cabe aqui uma observação importante. Uma vez que a exatidão das aproximações LTSN é limitada pela discretização das direções de propagação e espalhamento, não é possível atingir concordância total com o sistema Geant4, que trata de forma exata a dependência do fluxo angular em relação aos respectivos cossenos diretores. Além disso, a formulação LTSN possui outra limitação intrínseca, que se refere ao chamado “efeito raio”, que não pode ser contornado simplesmente pelo aumento do número de direções discretas a considerar na aproximação.

Conclusões

Considerando as limitações da formulação LTSN, os objetivos propostos foram atingidos, no sentido de obter códigos-fonte simples, de fácil depuração e bom desempenho computacional para as aplicações propostas, a saber, na obtenção de doses absorvida e do fator de *build-up* em barreiras protetoras compostas de multicamadas. Além disso, foi mostrado que a aplicação desse método, em duas dimensões, permite determinar a energia absorvida em diferentes meios materiais demandando um esforço computacional inferior ao do requerido por códigos que utilizam a técnica randômica.

Finalmente, conclui-se que uma variedade de processos de interação de fótons e elétrons com materiais de interesse para projetistas de blindagens, bem como para pesquisadores na área biológica, podem ser simulados pelo método proposto, que se mostrou robusto na solução de problemas descritos pela equação de transporte.

Referências

1. [1] Wood, J. *Computational Methods in Reactor Shielding*, Pergamon Press, London, 1982.
2. [2] Barichello, L. B. *Formulação Analítica para Solução de Ordenada Discreta Unidimensional*, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS, 1992.
3. [3] Batistela, C. H. F. *Estudo de Criticalidade pelo Método LTSN*, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS, 1997.
4. [4] Batistela, C. H.; Vilhena, M. T.; Borges, V. *Criticality Calculation by the LTSN Method*, Journal of Nuclear Science and Technology, 34: p. 603-606. 1997.
5. [5] Brancher, J. D. *Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenadas Discretas pelo Método LTSN para valores de N grandes*, Tese de Doutorado, PPGEM/UFRGS, 1998.
6. [6] Borges, V.; Vilhena, M. T.; Chies, *Cálculo de Espessura de Blindagem pela Combinação dos métodos LTSN e Decomposição*, In: XI ENFIR - XII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo Hidráulica, 1997 Poços de Caldas-MG, Brasil. Anais do XI ENFIR - XI Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo Hidráulica, Poços de Caldas-MG, Brasil, p. 202-206, 1997.
7. [7] Segatto, C. F. *Formulação LTSN para Problemas de Transporte sem Simetria Azimutal e Problemas Dependentes do Tempo*, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS, 1995.
8. [8] Segatto, C. F.; Vilhena, M. T. *Extension of the LTSN Formulation for Discrete Ordinates Problem Without Azimutal Symmetry*, Annals of Nuclear Energy, 21: p. 701-710. 1994.
9. [9] Vilhena, M. T., Barichello, L. B. *A new analytical approach to solve the neutron transport equation*. Kerntechnik. 56: (5), p. 334 – 336. 1991.
10. [10] Vilhena, M. T., Borges, V. B. *O Uso dos Métodos LTSN e Decomposição no Cálculo de Blindagens*, In: Simpósio sobre Integração Regional da Energia Nuclear, Rio de Janeiro, Brasil, p.477-481, 1995.
11. [11] Zabadal, R. S. *Solução da Equação Multidimensional de Transporte pelo Método LTSN*, Tese de Doutorado, PROMEC/UFRGS, 1994.
12. [12] Sauer, L. Z. *Solução da Equação de Transporte Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina: Uma Aplicação ao Cálculo de Dose*, Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada/UFRGS, 1997.
13. [13] Trindade, L. B. *Cálculo da dose pelo método LTPN aplicado a Equação de Boltzmann unidimensional para fótons em valores discretos de energia*. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Escola de Engenharia. UFRGS, Porto Alegre: PROMEC, 1997.
14. [14] Zabadal, R. S.; Vilhena, M. T. Barichello L. B. *Solution of the Three-Dimensional One-Group Discrete Ordinates Problem by the LTSN Method*, Annals of Nuclear Energy, 22: p. 131-134, 1995.
15. International Commission on Radiation Units and Measurements, Tissue Substitutes in Radiation Dosimetry and Measurement, ICRU 44, 1989, Maryland, USA.
16. Lunelli, R. *Solução da Equação de Transporte de Fótons para uma Placa Plana Heterogênea*, Modelo de Multigrupo com Núcleo de Espalhamento de Klein-Nishina, Porto Alegre: CPGMap da UFRGS, 2002.
17. Hirayama, H. *Calculation of Gamma-ray Exposure Buildup factors up to 40 mfp using the EGS4 Monte Carlo Code with a Particle Splitting*, Journal of Nuclear Science and Technology, 32: (12), p. 1201-1207, 1995.
18. 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, 35: (11), p. 816-829, 1998.
19. Borges, V.; Derivi, A. G. *Determination of the Criticality Parameters in Heterogeneous Slab by the LTSN Method*. In: 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, 2001, Rio de Janeiro. Proceedings of the 2nd. International Conference on Computational Heat and Mass Transfer. Rio de Janeiro: COPPE/UFRJ Federal University of Rio de Janeiro, 2001.
20. Bodmann, Bardo Ernest; Borges, V.; Vilhena, M. T.; Amaral, B. D. e Fernandes Julio Cesar Lombardo. *A closed-form formulation for the build-up factor and absorbed energy for photons and electrons in the Compton energy range in cartesian geometry*. World Journal of Nuclear Science and Technology, 1: p. 23-28, 2012.
21. Agostinelli, S. et al. *Geant4 – a simulation toolkit*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 506, 250–303. 2003.
22. Rodrigues, B.A.; Vilhena, M. T.; Borges, V. ; Hoff, G. *A closed-form solution for the two-dimensional Fokker-Planck equation for electron transport in the range of Compton Effect*. Annals of Nuclear Energy, 35: p. 958-962, 2008.

Recibido: 15/06/15.

Aprobado: 27/08/15.