

TRABAJO ESPECIAL
CARRERA DE INGENIERÍA NUCLEAR

Aplicación del Método Nodal AHOT-N al Transporte Acoplado de Electrones y Fotones

José Ignacio Duo

Director
Dr. Oscar M. Zamonsky

Co-Director
Ing. Herman Blaumann

Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional de Cuyo

Junio 2004

a Fernando, Joaquín y Ana

Resumen

Este trabajo trata de la aplicación del Método Nodal de Orden Arbitrario al transporte acoplado de electrones y fotones. Durante su desarrollo, se amplió y validó un código de Ordenadas Discretas que permitió evaluar las ventajas de utilizar órdenes de desarrollo espacial variable por partícula.

Los resultados obtenidos, combinando este tratamiento con un refinamiento local de la malla espacial a partir de un estimador de error a posteriori, son alentadores.

A partir de secciones eficaces generadas con el código CEPXS, se simularon espectros de fotones de blancos de aceleradores lineales de electrones, y se computaron perfiles de dosis y deposición de carga en problemas unidimensionales útiles en el estudio de tratamientos radiantes.

Los resultados se compararon con los códigos comerciales ONELD y MCNP, encontrándose que concuerdan satisfactoriamente.

Abstract

This work is about the application of the Arbitrary High Order Nodal Method to coupled electron photon transport. A Discrete Ordinates code was enhanced and validated which permitted to evaluate the advantages of using variable spatial development order per particle.

The results obtained using variable spatial development and adaptive mesh refinement following an a posteriori error estimator are encouraging.

Photon spectra for clinical accelerator target and, dose and charge depositio profiles are simulated in one-dimensional problems using cross section generated with CEPXS code.

Our results are in good agreement with ONELD and MCNP codes.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Transporte de Partículas Acopladas	2
1.1.1. Un ejemplo: perfil de dosis de fotones de 4 MeV en agua.	3
1.2. Conclusiones	6
2. Métodos Nodales de Transporte	7
2.1. El Método Nodal	7
2.2. Aproximación Multigrupo	9
2.3. Método AHOT-N Unidimensional	11
2.3.1. Cálculo de coeficientes de peso	12
2.3.2. Reconstrucción del flujo	18
2.3.3. Estimador de error <i>a posteriori</i>	19
2.4. Aceleración Sintética S_2	21
2.4.1. Sobre la Convergencia	24
2.5. Conclusiones	26
3. Modelo Determinístico de Transporte Acoplado	27
3.1. Método de Cálculo Determinístico	27
3.2. Secciones Eficaces	29
3.2.1. Modelos físicos	29
3.2.2. Operador de moderación continua restringido	30
3.2.3. El poder de frenamiento restringido	32
3.3. Cálculos Estocásticos vs. Determinísticos	32
3.3.1. Indexación energética	33
3.4. Conclusiones	34
4. Implementación y Validación	35
4.1. Implementación	35
4.1.1. Esquema del código AHOT	36
4.2. Validación de Cálculos Anisotrópicos	38
4.3. Validación de Cálculos Multigrupo	43
4.3.1. Acople de campos con diferente orden de desarrollo espacial	44
4.4. Conclusiones	46

5. Cálculos de Transporte Acoplado	48
5.1. Blanco de Cobre	48
5.1.1. Corriente parcial de fotones salientes del blanco	48
5.1.2. Deposición de energía	54
5.1.3. Deposición de carga	58
5.2. Fantoma de Agua	60
5.2.1. Distribución de dosis	61
5.3. Características del Operador de Moderación de Segundo Orden	63
5.4. Interfaces	66
5.4.1. Blanco de berilio y tungsteno	67
5.5. Conclusiones	69
6. Conclusiones	70
A. Solución Analítica de la Ecuación de Transporte 1D en la Aproximación SN	72
B. Positividad del Flujo para Orden de Desarrollo Espacial Constante	74
Bibliografía	76
Índice de Figuras	79
Índice de Tablas	86
Agradecimientos	87

Capítulo 1

Introducción

El aumento de precisión en la determinación de dosis administrada en tratamientos radiantes ha resultado ser uno de los factores importantes en la evolución de técnicas de radio oncología. La exactitud de la distribución de dosis permite llevar al límite la capacidad del tratamiento controlando el detrimento del tejido sano y maximizando las probabilidades de éxito. Hasta el presente, se ha trabajado en el seguimiento de pacientes con técnicas fundadas en mediciones (fuera de línea) y cálculos basados en tablas de datos medidos y correlaciones semi-empíricas. Últimamente se introducen las mediciones "in-vivo", que permiten hacer una gestión de calidad de los tratamientos, y se está evolucionando en la terapia conformacional. Un avance similar a nivel de cálculo de dosis se está desarrollando al permitir simulaciones basadas en primeros principios de interacción de la radiación con la materia.

Los códigos de Monte Carlo han permitido la determinación de dosis con relativa exactitud. En las últimas décadas se ha puesto particular énfasis en desarrollar métodos que permitan aumentar la precisión en interfaces inhomogéneas donde el método de historias condensadas para electrones [8] presenta desventajas. Con el advenimiento de capacidad computacional cada vez más rápida se están utilizando códigos estocásticos para cálculo de sistemas cada vez más grandes como son el cabezal de los aceleradores y el paciente mismo. Aún así, las capacidades de cálculo necesarias para hacer el seguimiento de pacientes resultan exorbitantes.

El desafío que se presenta es utilizar un método de cálculo determinístico que han mostrado ser especialmente eficientes en la resolución de perfiles de dosis para resolver sistemas grandes con una capacidad de cálculo razonable.

En extensos trabajos llevados a cabo por Morel, Lorence et al. [32, 35, 14] se probó la factibilidad de modelar el transporte de electrones con códigos determinísticos. Por otro lado Azmy, Zamonsky et al. mostraron la ventajas del método AHOT-N (Arbitrary High Order Transport-Nodal) para el transporte de partículas neutras. *Este trabajo propone el desarrollo y validación de un código que permita evaluar la ventajas de utilizar el método AHOT-N para el transporte acoplado electrón/fotón.*

Se contaba originalmente con un código unidimensional mono-energético con fuente de scattering isotrópica desarrollado por Zamonsky [45]. A partir de éste se implementó la capacidad de resolver problemas multigrupo con fuente de scattering de anisotropía de orden arbitrario para abordar simulaciones de transporte acoplado.

1.1. Transporte de Partículas Acopladas

La capacidad de transporte acoplado se necesita para un número cada vez mayor de aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, se utiliza para estudiar la respuesta de componentes electrónicos bajo irradiación artificial o en artefactos espaciales. En este trabajo, presentamos la necesidad del cálculo acoplado desde la aplicación de tratamientos radiantes que ha sido la motivación que ha dirigido nuestros esfuerzos.

En la literatura de física radiológica y dosimetría se presenta el concepto de *kerma* como la energía por unidad de masa (J/kg) que la radiación indirectamente ionizante imprime a las partículas cargadas [2]. Para el caso de fotones se trabaja con la siguiente expresión

$$K = \int_0^{E_{max}} \Psi(E) \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right) dE \quad (1.1)$$

donde $\Psi(E)$ es la distribución diferencial de fluencia energética de fotones ($Jm^{-2}keV$) y μ_{tr}/ρ es el coeficiente másico de transferencia de energía (cm^2g^{-1}). También se descompone el kerma en dos términos

$$K = K_c + K_r \quad (1.2)$$

donde la primera componente responde a la energía transferida por la radiación indirectamente ionizante a las partículas cargadas, excluyendo la pérdidas por radiación de frenamiento y se llama *kerma de colisión*. La segunda componente corresponde a la energía transferida que eventualmente es irradiada por las partículas cargadas (*bremsstrahlung*), llamada por tanto *kerma de radiación*.

Debe reconocerse que es la *dosis*, o energía impartida por unidad de masa, la que determina el efecto de la radiación. Mientras, algunos efectos son proporcionales a la dosis otros dependen en forma más compleja. De cualquier manera, la dosis absorbida es la magnitud más importante en física radiológica.

Los conceptos de kerma reflejan el hecho de que experimentalmente es mucho más laborioso determinar la dosis que la atenuación del haz de fotones. Por ello, se ha puesto especial énfasis en encontrar relaciones entre la dosis y el kerma. Así por ejemplo se desarrollaron conceptos de equilibrio de radiación y equilibrio de partículas cargadas. En el caso de que se cumplan las condiciones para que se establezcan estos equilibrios la dosis (D) puede ser determinada a partir del kerma por

$$D = K \quad \text{si existe equilibrio de radiación} \quad (1.3)$$

$$D = K_c \quad \text{si existe equilibrio de partículas cargadas} \quad (1.4)$$

A pesar de que existen algunas situaciones particulares donde se puede relacionar simplemente el kerma con la dosis, en la situación más general será necesario realizar calibraciones experimentales para determinarla.

La capacidad de simulaciones de transporte acoplado que queremos enfatizar aquí es que provee de una herramienta para estudiar la distribución de la dosis en situaciones generales. Es decir, hacen factible la determinación de la dosis a partir de la fluencia energética de fotones, electrones y positrones calculadas.

De este modo hemos presentado necesidad del cálculo acoplado en relación a una de sus aplicaciones que está motivando desarrollos en numerosos departamentos de física médica [44, 40, 24]. A continuación planteamos la problemática que genera la determinación de la fluencia energética de partículas cargadas con el siguiente ejemplo.

1.1.1. Un ejemplo: perfil de dosis de fotones de 4 MeV en agua.

Entre las técnicas de radioterapia, algunas suponen la irradiación del paciente con un haz externo de fotones energéticos. Para la calibración del haz, es decir, la determinación de la distribución de dosis que genera, se utilizan fantomas de agua. El agua, además de ser un material fácilmente manejable, emula bastante bien las condiciones de irradiación del cuerpo humano. En este ejemplo simulamos un haz plano de fotones de 4 MeV incidiendo sobre la cara izquierda de un slab de 20 cm de agua como una aproximación unidimensional a una situación de calibración.

El precio a pagar para conseguir computar la dosis en casos generales es la determinación del campo de partículas cargadas. Sin embargo, a diferencia de las partículas neutras, los electrones interactúan casi continuamente con el material. Esta característica implica que el flujo de electrones presentará gradientes espaciales muy abruptos frente a interfaces o inhomogeneidades. Esto motiva, además de un tratamiento especial de las secciones eficaces que se presentará en el capítulo 3, un tratamiento especial de la discretización espacial, como se muestra en los siguientes resultados.

Resultados

En la Fig. 1.1 se muestra el cálculo de kerma de colisión utilizando el método determinístico con el código AHOT. Obsérvese que la curvatura de la curva kerma responde a la atenuación de un haz plano de fotones en un medio homogéneo. El cálculo se llevó a cabo sobre una malla de espesor 2 cm . Este refinamiento espacial resulta más que suficiente para resolver con precisión el campo de radiación de las partículas neutras, siendo el camino libre medio de fotones de 4 MeV en agua de 29 cm . Sin embargo, si se acoplan en el cálculo partículas cargadas y se pretende ingenuamente utilizar la misma malla, aparecen problemas como el sobrepico de dosis cerca del borde izquierdo del dominio que muestra la figura.

Para resolver el problema abordamos en este trabajo dos técnicas. Por un lado, se puede utilizar una malla refinada localmente para resolver los gradientes de flujo de las partículas cargadas. Esta solución se presenta en la Fig. 1.2, donde se grafica la dosis computada sobre una malla generada con un estimador de error *a posteriori* a partir del cálculo de la Fig. 1.1. Esta estratagema elimina el error y nos brinda información correcta del perfil de deposición de energía. Sin embargo, la malla que resulta acorde para el transporte de electrones conlleva un refinamiento que es excesivo para los fotones.

Por otro lado, se presenta la posibilidad, a través del método de nodal de orden arbitrario que presentamos en este trabajo, de utilizar un operador de discretización espacial de mayor orden al lineal. Este método se utiliza en la Fig. 1.3, donde los flujos se han desarrollado hasta orden ocho dentro de cada micromalla. De esta forma, tam-

bién se elimina el error con la ventaja de que no se requirió refinar la malla. De este modo, el nuevo operador “compatibilizó” la malla para partículas neutras y cargadas. Las curvas son representaciones de soluciones continuas que provee al Método AHOT. Sobre las curvas se han marcado con círculos las evaluaciones en las interfaces de celda para marcar la discretización espacial. Vale la pena aclarar que los primeros dos cálculos corresponden a operadores de discretización espacial lineal, pero la solución continua no es lineal entre los valores de interfaces, como se verá en la Sección 2.3.2 y se observa en el recuadro de la Fig. 1.1.

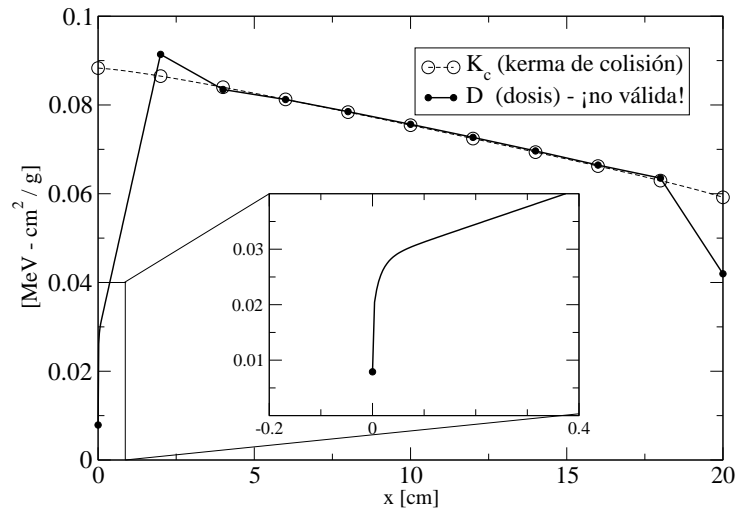


Figura 1.1: Un haz plano de fotones de 4 MeV de intensidad unitaria incide en forma normal sobre un fantoma de agua. La discretización espacial que permite calcular la curva de kerma, no es suficiente para resolver la deposición de energía. El recuadro remarca que la solución es continua y no es lineal a trozos.

Antes de terminar este ejemplo, discutimos la naturaleza del perfil de dosis que muestran las simulaciones. En el seno del material existe una condición en la cual la dosis depositada localmente se debe a electrones generados en dicho punto y a electrones generados “aguas arriba” y “aguas abajo”. Esta condición sólo se ve modificada por el endurecimiento del haz a medida que se atenúa, con lo cual va cambiando levemente la curvatura de la dosis en forma casi paralela al kerma de colisión a medida que ambos disminuyen con la profundidad. Esta situación se conoce como equilibrio transitorio de partículas cargadas en cuyo caso la dosis se puede determinar a partir del kerma de colisión según

$$D = K_c e^{-\mu' \bar{x}} \quad \text{si existe equilibrio transitorio de partículas cargadas} \quad (1.5)$$

donde μ' es el coeficiente de atenuación del haz plano y \bar{x} es la distancia media que las partículas cargadas transportan su energía cinética. Cuando $\mu\bar{x} \ll 1$, como en este caso ($\mu \simeq 0.035 \text{ cm}^{-1}$, $\bar{x} \sim 0.2 \text{ cm}$), se puede aproximar la exponencial por

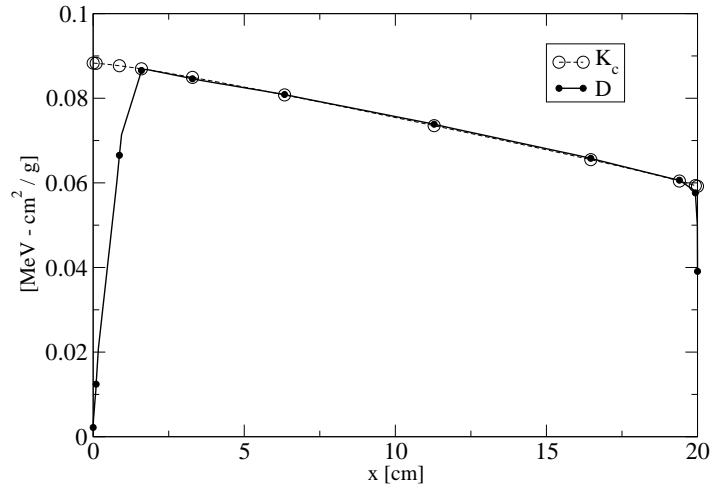


Figura 1.2: Dosis de fotones de 4 MeV en agua. Un refinamiento local de la malla permite resolver el perfil de dosis pero la resolución espacial necesaria es excesiva para las partículas neutras.

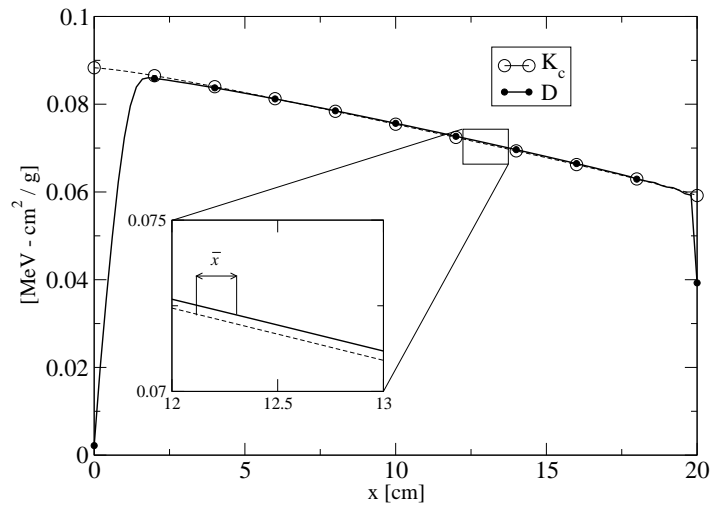


Figura 1.3: El uso de un operador de discretización espacial de mayor orden permite resolver sobre una malla “gruesa” el campo de fotones y electrones. El recuadro muestra que en este caso de equilibrio transitorio de partículas cargadas, la dosis es paralela al kerma de colisión. (\bar{x} se define en el texto)

$$D = K_c \left(1 + \mu' \bar{x} + \frac{(\mu' \bar{x})^2}{2!} + \dots \right) \cong K_c (1 + \mu' \bar{x}) \quad (1.6)$$

que muestra que μ' es la pendiente común del kerma de colisión y la dosis como se observa en el recuadro de la Fig. 1.3.

Entonces, ¿por qué se perturba la dosis en las cercanías de las interfaces? La respuesta reside en observar que cerca de la interface izquierda no hay contribuciones de electrones de aguas arriba y parte de los electrones dispersados hacia atrás escapan del slab llevando parte de su energía original. En forma análoga, para la interface derecha, no hay contribuciones de aguas abajo y parte de la energía escapa.

1.2. Conclusiones

En este capítulo se ha presentado la necesidad y complejidad de cálculos acoplados. En particular, se introdujo la problemática de cálculo de dosis relacionada con aplicaciones de tratamiento radiante. Mediante un ejemplo hemos puesto de manifiesto la necesidad utilizar algoritmos que compatibilicen el transporte determinístico de partículas cargadas y neutras. Existen ciertamente soluciones tales como trabajar sobre múltiple mallas que aquí no abordamos. *Nosotros, en cambio, hemos desarrollado dentro del método AHOT-N dos posibles esquemas que, lejos de ser incompatibles, son mutuamente beneficiosos y que juntos permiten resolver con eficiencia el transporte acoplado.*

El desarrollo de la aplicación del método nodal AHOT al cálculo acoplado que se trata en los siguientes capítulos se ha organizado de la siguiente forma:

En el Capítulo 2 se plantea el método de resolución de la ecuación de Boltzmann como modelo del transporte de radiación de una partícula. La exposición muestra las distintas aproximaciones que permiten reducir el problema a un sistema de ecuaciones algebraicas. Específicamente, la aplicaciones de la aproximación multigrupo sobre la variable energética, la aproximación de ordenadas discretas sobre la variable angular y la aproximación nodal de orden arbitrario sobre la variable espacial. Esta sección termina con algunas características particulares del método. Entre ellas, se revisa el cálculo de los coeficientes de peso, parámetro que define al método nodal y le otorga sus características de alta precisión. Por otro lado, el método permite obtener dos soluciones de distinta precisión, que llamaremos solución del algoritmo base y solución de la reconstrucción respectivamente. Estas soluciones permiten construir un estimador de error a posteriori, herramienta esencial para determinar la precisión del cálculo y desarrollar esquemas adaptivos. Por último, demostramos que el método admite la aplicación de Aceleración S2 Sintética desarrollada por Larsen, Morel y Lorence [26].

En el Capítulo 3 se presenta el modelo determinístico utilizado para la resolución de transporte de partículas acopladas. Se citan los modelos físicos y datos utilizados para representar la interacción de las partículas con la materia. Seguidamente se muestra la expresión de secciones eficaces para representar el operador de moderación continua restringido de electrones que hace posible el tratamiento del núcleo de dispersión de electrones. Finalmente se agrega una comparación entre los métodos de cálculo determinístico y estocástico. Sobre estos últimos se expone una discusión sobre el tipo de interpolación de los parámetros de transporte.

El Capítulo 4 se describen algunas características de la implementación y se muestran algunos casos del trabajo de validación de la ampliación anisotrópica y multigrupo del código. En este punto, se formulan en el Capítulo 5 problemas completos de transporte acoplado y a partir de las problemáticas generadas, se plantean algunas soluciones que dan pie a futuras contribuciones, que se discuten en las Conclusiones.

Capítulo 2

Métodos Nodales de Transporte

2.1. El Método Nodal

Los métodos nodales consisten en dividir el dominio en zonas homogéneas llamadas *nodos* en los cuales se resuelve la ecuación de transporte en su forma integral o íntegrodiferencial, usando alguna aproximación para el acople entre nodos. Entre estas aproximaciones, los métodos nodales transversos reducen el problema de transporte multidimensional a un conjunto de problemas unidimensionales acoplados, integrando la ecuación de transporte en dos de sus tres variables espaciales. Las ecuaciones resultantes son resueltas analíticamente dentro de cada nodo. Las expresiones así obtenidas son evaluadas numéricamente por medio de una expansión polinómica de los flujos y fuentes dentro de los integrandos. Este procedimiento conduce a un sistema de ecuaciones que puede ser resuelto en forma matricial o iterativa.

La ecuación de transporte de Boltzmann en estado estacionario se expresa de la siguiente manera

$$\Omega \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \Omega, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \Omega, E) = Q(\vec{r}, \Omega, E) \quad (2.1)$$

donde

$$Q(\vec{r}, \Omega, E) = \int_0^{E_{max}} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \mu_0) \psi(\vec{r}, \Omega', E') + q(\vec{r}, \Omega, E)$$

Ω dirección de vuelo de la partícula

E energía de la partícula

ψ flujo angular ($cm^{-2}s^{-1}sr^{-1}eV^{-1}$)

Σ_t sección eficaz total (cm^{-1})

Σ_s sección eficaz de dispersión (cm^{-1})

$$\mu_0 = \Omega' \cdot \Omega$$

$q(\vec{r}, \Omega, E)$ fuente externa ($cm^{-2}s^{-1}sr^{-1}eV^{-1}$) que incluye tanto fuentes fijas tomadas como condiciones de contorno como fuentes debidas a otras partículas, tal será el caso en cálculos acoplados

La aplicación de la aproximación multigrupo que se desarrolla en la Sección 2.2 permite resolver la Ec. (2.1) mediante un sistema de ecuaciones del tipo monoenergético acopladas utilizando un esquema de series de Von Neumann [29] o más conocido como iteraciones sobre la fuente de scattering. Por otro lado, el método de ordenadas discretas, tratado en la Sección 2.3 resulta ser el más adecuado para el tratamiento de la variable angular [17].

Estas aproximaciones reducen el problema a establecer la dependencia espacial de la Ec. (2.1). La ecuación a resolver para cada dirección y grupo energético, dentro de un paralelepípedo, puede ser expresada de la siguiente manera, en un sistema de coordenadas cartesianas.

$$\mu \frac{\partial \psi_g^m(\vec{r})}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi_g^m(\vec{r})}{\partial y} + \xi \frac{\partial \psi_g^m(\vec{r})}{\partial z} + \Sigma_{tg}(\vec{r}) \psi_g^m(\vec{r}) = Q_g^m(\vec{r}) \quad (2.2)$$

siendo el índice g representativo del grupo y m de la dirección. Omitimos estos índices en el resto de la sección por simplicidad.

La aplicación del Método Nodal Transverso a la Ec. (2.2) permite la resolución espacial. Si se integra esta ecuación en las variables y y z dentro de un nodo homogéneo, se obtiene una ecuación unidimensional cuya incógnita es una nueva función $\psi_x(x)$, que resulta ser el valor medio del flujo angular en el plano yz donde la fuente está disminuida en un término representativo de las fugas transversales.

$$\mu \frac{\partial \psi_x(x)}{\partial x} + \Sigma_t \psi_x(x) = Q_x(x) - L_x(x) \quad (2.3)$$

donde

$$L_x(x) = \int_y \int_z \eta \frac{\partial \psi}{\partial y} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} dy dz$$

Nótese que la Ec. (2.3) corresponde a un problema unidimensional equivalente en presencia de una fuente efectiva. Si este procedimiento es realizado con las otras coordenadas espaciales, se obtendrán dos ecuaciones de la misma forma que la anterior para $\psi_y(y)$ y $\psi_z(z)$. La Ec. (2.3) puede ser resuelta analíticamente, obteniéndose como solución de la misma en el caso de direcciones positivas

$$\psi_x(x) = \psi_x(x_{k-1/2}) e^{-\frac{\Sigma_t \Delta x}{2\mu}} + \frac{1}{\mu} \int_{x_{k-1/2}}^x dx' \left[Q_x(x') - L_x(x') \right] e^{-\frac{\Sigma_t}{\mu}(x-x')} \quad (2.4)$$

Las ecuaciones deducidas hasta el momento no contiene aproximación espacial alguna, por lo que si se conoce la expresión de la fuente efectiva y se puede integrar, se tendrá la solución analítica del problema. La resolución numérica supone la aproximación de estas fuentes. Se utiliza una expansión de los flujos en cada nodo y de los flujos que determinan las fugas en una base de funciones ortogonales. El orden de desarrollo de estas expansiones da lugar a los distintos métodos nodales.

Enfatizamos, al finalizar esta sección, que el Método Nodal Transverso conduce a la resolución de ecuaciones unidimensionales que son el objeto de estudio de este trabajo.

2.2. Aproximación Multigrupo

Dado que el método nodal transversal resuelve una ecuación de transporte unidimensional, resulta importante analizar su forma unidimensional. Por ello nos abocamos a la resolución de problemas con geometría unidimensional cartesiana donde la ecuación de Boltzmann se reduce a

$$\mu \frac{\partial \psi(x, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, \mu, E) \psi(x, \mu, E) = \int_0^{E_{max}} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \Sigma(x, \mu_0, E' \rightarrow E) \psi(x, \mu', E') + q(x, \mu, E) \quad (2.5)$$

Se plantea el problema con condiciones de borde apropiadas en el dominio $x \in [0, T]$. $\mu \in [-1, 1]$ es el coseno del ángulo entre el eje x positivo y la dirección de movimiento de las partículas. La sección eficaz total, de absorción y de scattering son no-negativos y constantes a trozos en x .

Para derivar las ecuaciones multigrupo [29], se divide el rango de energías en G intervalos, donde E_1 es la máxima energía de partículas y $E_{G+1} = E_{min}$ es la energía de mínima del cálculo o *energía de corte*. Integrando la Ec. (2.5) entre E_g y E_{g-1} se obtiene

$$\mu \frac{\partial \psi_g}{\partial x} + \Sigma_g(x, \mu) \psi_g(x, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^{+1} d\mu' \Sigma_{gg'}(x, \mu_0) \psi_{g'}(x, \mu') + q_g(x, \mu) \quad (2.6)$$

donde

$$\begin{aligned} \psi_g(x, \mu) &= \int_g dE \psi(x, \mu, E) && \text{flujo neutrónico angular del grupo } g \\ q_g(x, \mu) &= \int_g dE q(x, \mu, E) && \text{fuente externa al grupo } g \\ \Sigma_g(x, \mu) &= \frac{\int_g dE \Sigma(x, E) \psi(x, \mu, E)}{\psi_g(x, \mu)} && \text{sección eficaz total del grupo } g. \\ \Sigma_{gg'}(\mu, \mu') &= \frac{\int_g dE \Sigma_s(x, \mu_0, E' \rightarrow E) \psi(x, \mu', E')}{\psi_g(x, \mu)} && \text{sección eficaz de scattering del} \\ &&& \text{grupo } g' \text{ al grupo } g. \end{aligned}$$

Nótese que las definiciones de las cantidades grupales dependen de la solución del problema. Para soslayar este dilema, podemos suponer que dentro de cada grupo el flujo angular puede ser aproximado por el producto de una función de la energía y el flujo grupal.

$$\psi(x, \mu, E) \approx f(E) \psi_g(x, \mu) \quad (2.7)$$

Las secciones eficaces utilizadas en este trabajo han sido generadas suponiendo que la función $f(E)$ es constante en cada grupo. De modo que se reducen a

$$\Sigma_t(x) = \frac{1}{\Delta E_g} \int_g dE \Sigma(x, E) \quad (2.8)$$

$$\Sigma_{gg'}(\mu_0) = \frac{1}{\Delta E_{g'}} \int_g dE \int_{g'} dE' \Sigma_s(x, \mu_0, E' \rightarrow E) \quad (2.9)$$

Se supone que la dependencia angular de las secciones eficaces de dispersión se puede representar satisfactoriamente por un desarrollo en polinomios de Legendre hasta orden L . La factibilidad de esta representación se discute en la Sección 3.1. Recordemos, sin embargo, que el mismo resultado numérico se obtiene considerando que es el flujo quien se puede representar por un desarrollo en polinomios de Legendre hasta orden L , independientemente de si la Ec. (2.10) es una representación satisfactoria. Por ejemplo, si en el problema el flujo isotrópico sólo será necesario conocer las integrales angulares de las secciones eficaces de dispersión para resolverlo.

$$\begin{aligned}\Sigma_{gg'}(x, \mu_0) &= \sum_{l=0}^L (2l+1) \Sigma_{lgg'} P_l(\mu_0) \\ \Sigma_{lgg'} &= \int_{-1}^{+1} d\mu \Sigma_{gg'}(\mu)\end{aligned}\quad (2.10)$$

Notemos que los momentos $\Sigma_{lgg'}$ son independientes de las direcciones, por lo que un solo grupo de secciones eficaces se puede guardar y utilizar con múltiples cuadraturas angulares. Además, esta representación permite descartar los flujos angulares una vez calculadas sus contribuciones a los momentos del flujo. Dado que en cálculos neutrónicos el número de momentos es generalmente mucho menor que el número de direcciones, se reduce enormemente la cantidad de memoria utilizada [17]. Este no es el caso particular de los cálculos acoplados electrón/fotón donde Morel [33] recomienda utilizar cuadraturas angulares S_N con desarrollos angulares de orden $L = N - 1$ para secciones eficaces deducidas a partir del operador de Boltzmann Fokker-Planck.

El código AHOT permite utilizar un número arbitrario de momentos angulares, dado que para cálculos de fotones y electrones de alta energía los flujos pueden presentar fuertes anisotropías. Nosotros trabajamos con 32 momentos angulares para obtener una buena representación de haces de electrones con incidencia normal en blancos de acelerador.

Hemos visto cómo la aproximación multigrupo nos permite convertir la Ec. (2.1) en un conjunto de ecuaciones monoenergéticas acopladas. Finalmente comentamos que la hipótesis de separabilidad impone una restricción que debe ser tomada en cuenta particularmente cerca de las interfaces donde el espectro cambia a medida que nos aproximamos a la interface. Esto genera una relación entre la discretización energética y la espacial.

2.3. Método AHOT-N Unidimensional

La aproximación multigrupo nos permite abocarnos a la ecuación de Boltzmann monoenergética que equivale a la Ec. (2.6) sin índices de grupo donde, ahora, la fuente externa incluye la dispersión desde otros grupos energéticos

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \Sigma(x) \psi(x, \mu) = \int_{-1}^{+1} \Sigma_s(x, \mu_0) \psi(x, \mu') d\mu' + q(x, \mu) \quad (2.11)$$

Por otra parte, la aproximación de ordenadas discretas (S_N) consiste en requerir que la ecuación sea válida en una serie de direcciones discretas y aplicar una aproximación cuadrática compatible para el término integral. En este trabajo nos restringimos al uso de la cuadratura gaussiana. Introduciendo en la Ec. (2.11) estas aproximaciones obtenemos una ecuación para cada dirección $m = 1, \dots, N$

$$\mu_m \frac{d\psi_m}{dx} + \Sigma_t(x) \psi_m(x) = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_m) \Sigma_{sl}(x) \phi_l(x) + q(x, \mu_m) \quad (2.12)$$

donde

$$\phi_l = \sum_{m=1}^N w_m P_l(\mu_m) \psi_m(x)$$

w_m es el peso en dirección m normalizados según $\sum_{m=1}^N w_m = 1$

El orden de discretización angular y el desarrollo de las secciones eficaces definen el método " $P_l S_n$ " [17]. Como indicamos en la sección anterior, en los casos de transporte acoplado electrón/fotón nos restringimos al uso $P_{N-1} S_N$.

Para resolver numéricamente la variable espacial se utilizó el esquema nodal en su forma de esquema de diferencias pesadas (WDD) desarrollado por Azmy y Zamonsky [3, 4]. Explicamos en este punto la idea básica del método y citamos a continuación las ecuaciones de implementación.

Se discretiza la variable espacial definiendo una malla de celdas C_k . Tomando las secciones eficaces constantes a trozos, cuyas discontinuidades coinciden con interfaces de celda tenemos

$$\begin{aligned} C_k &= \{x/x_{k-1/2} \leq x < x_{k+1/2}\} \\ \Sigma(x) &= \Sigma_k & x \in C_k \\ h_k &= x_{k+1/2} - x_{k-1/2} & k = 1, \dots, K \end{aligned}$$

Habiendo discretizado el dominio en celdas homogéneas disjuntas, en el método AHOT-N unidimensional, la fuente se expande en el interior de cada celda en polinomios de Legendre hasta un orden Λ predeterminado. Recordamos que en esta geometría las fugas laterales son nulas. Multiplicando la ecuación de transporte resultante por cada polinomio e integrando en cada celda, se obtienen $\Lambda + 1$ ecuaciones de balance que relacionan los momentos del flujo angular en el interior de cada celda con el flujo angular en las interfaces y los momentos de la fuente. Resolviendo en forma analítica la ecuación de transporte (con la fuente truncada a orden Λ) se obtienen nuevas relaciones entre las incógnitas mencionadas que completan el sistema de ecuaciones anterior.

La solución de este esquema numérico está dada por los $\Lambda + 1$ momentos espaciales del flujo y los flujos salientes de cada celda en cada dirección discreta.

El momento de orden λ de la expansión en polinomios de Legendre dentro de una malla está dado por

$$\psi_m(\lambda, k) = \frac{1}{h_k} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi_m(x) p_\lambda(x) dx$$

donde $p_\lambda(x) = P_\lambda(2/h_k(x - x_k))$, P_λ es el polinomio no normalizado de Legendre de orden λ y x_k es la coordenada central de la celda. La ecuación de balance correspondiente al momento λ en la celda C_k para la dirección m es

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{h_k} \left\{ \psi_m(x_{k+1/2}) - (-1)^\lambda \psi_m(x_{k-1/2}) - 2 \sum_{l=0,1^*}^{\lambda-1} (2l+1) \psi_m(l, k) \right\} + \Sigma_{ik} \psi_m(\lambda, k) \\ = Q_m(\lambda, k) \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde $l = 0, 1^*$ indica que $l = 0$ si λ es impar, $l = 1$ si λ es par, y el incremento de la sumatoria es igual a dos, y

$$Q_m(\lambda, k) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_m) \Sigma_{sik} \phi_l(\lambda, k) + q_m(\lambda, k) \quad (2.14)$$

$$\phi_l(\lambda, k) = \sum_{m=1}^N w_m P_l(\mu_m) \psi_m(\lambda, k) \quad (2.15)$$

La relación entre los flujos saliente y entrante, con los momentos del flujo para la celda C_k viene dada por

$$\begin{aligned} \left(\frac{1 + \alpha_{mk}}{2} \right) \psi_m(x_{k+1/2}) + \left(\frac{1 - \alpha_{mk}}{2} \right) \psi_m(x_{k-1/2}) = \\ \sum_{\lambda=0, par}^{\Lambda} (2\lambda + 1) \psi_{m(\lambda, k)} + \sum_{\lambda=1, imp}^{\Lambda} (2\lambda + 1) \alpha_{mk} \psi_{m(\lambda, k)} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Definida así la aproximación espacial, podemos inaugurar la nomenclatura " $P_l S_n \Lambda_q$ " como la designación de las aproximaciones realizadas para un cálculo particular del método AHOT-N.

El método numérico queda definido por las Ec.(2.13) y (2.16). En esta última ecuación fueron introducidos los coeficientes de peso α_{mk} que dependen del orden de expansión Λ , como mostramos en la siguiente sección.

2.3.1. Cálculo de coeficientes de peso

Los coeficientes de peso espaciales, sobre los cuales está basada la forma WDD del método AHOT-N, están definidos por

$$\alpha_\Lambda(t) = \frac{\cosh(t) - \sum_{\lambda=0, par}^{\Lambda} \xi_\lambda(t)}{\sinh(t) - \sum_{\lambda=1, imp}^{\Lambda} \xi_\lambda(t)} \quad (2.17)$$

donde se ha definido $t \equiv \sigma h/2\mu$, y ξ está dado por

$$\xi_\lambda(t) = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_{-1}^{+1} e^{tx} P_\lambda(x) dx \quad (2.18)$$

El numerador de la Ec. (2.17) es igual al resto de orden $\Lambda + 1$ del desarrollo en polinomios de Legendre del coseno hiperbólico de t , mientras que el denominador es el resto del mismo orden del desarrollo del seno hiperbólico. Teniendo en cuenta que cuando t tiende a cero o Λ es grande ambos restos serán números chicos, puede concluirse que en estos casos el cálculo de los coeficientes de peso espaciales pueden contaminarse de errores de redondeo [4].

Integrando por partes la Ec. (2.18) se obtiene que

$$\begin{aligned} \xi_\lambda(t) &= \frac{2\lambda + 1}{t} \left[\sinh(t) - \sum_{l=1, \text{imp}}^{\lambda} \xi_l(t) \right] && \text{si } \lambda \text{ es par} \\ \xi_\lambda(t) &= \frac{2\lambda + 1}{t} \left[\cosh(t) - \sum_{l=0, \text{par}}^{\lambda} \xi_l(t) \right] && \text{si } \lambda \text{ es impar} \end{aligned}$$

de donde la Ec. (2.17) se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \alpha_\Lambda(t) &= \frac{2\Lambda + 1}{2\Lambda + 3} \frac{\xi_{\Lambda+1}(t)}{\xi_\Lambda(t)} && \text{si } \lambda \text{ es par} \\ \alpha_\Lambda(t) &= \frac{2\Lambda + 3}{2\Lambda + 1} \frac{\xi_\Lambda(t)}{\xi_{\Lambda+1}(t)} && \text{si } \lambda \text{ es impar} \end{aligned}$$

Por otro lado, se demuestra que la expresión asintótica de los coeficientes es [45]

$$\begin{aligned} \alpha_\Lambda(t) &= \frac{t}{2\Lambda + 3} && \text{si } \lambda \text{ es par} \\ \alpha_\Lambda(t) &= \frac{2\Lambda + 3}{t} && \text{si } \lambda \text{ es impar} \end{aligned}$$

Cálculo recursivo de ξ

Es factible calcular ξ integrando numéricamente la Ec. (2.18). Esta forma de cálculo presenta el inconveniente de que queda a elección arbitraria del programador la regla de cálculo, Simpson por ejemplo, y el número de puntos de evaluación del integrando. Como método alternativo se implementó la forma recursiva de cálculo que presentamos a continuación. Para ello se define

$$I_\lambda(x) \equiv \int_{-1}^x e^{-t(x-x')} P_\lambda(x') dx'$$

Integrando por partes se obtiene

$$I_\lambda(x) = \frac{1}{t} \left\{ P_\lambda(x) - (-1)^\lambda e^{-t(x+1)} - \int_{-1}^x e^{-t(x-x')} \frac{dP_\lambda(x')}{dx'} dx' \right\} \quad (2.19)$$

Usando la siguiente expresión para las derivadas de P_λ

$$\frac{dP_\lambda}{dx} = \sum_{l=0,1^*}^{\lambda-1} (2l+1)P_l(x)$$

la Ec. (2.19) se expresa como

$$I_\lambda(x) = \frac{1}{t} \left\{ P_\lambda(x) - (-1)^\lambda e^{-t(x+1)} - \sum_{l=0,1^*}^{\lambda-1} (2l+1)I_\lambda(x) \right\}$$

Obsérvese que

$$\xi_\lambda(t) = \frac{2\lambda+1}{2} e^t I_\lambda(1)$$

obteniéndose una expresión recursiva para el cálculo de α .

Resultados Numéricos de Coeficientes de Peso

Se calcularon los coeficientes de peso utilizando la regla de Simpson para evaluar la Ec. (2.18) con 10000 intervalos de integración y se compararon con el cálculo recursivo. Primeramente se compararon dentro de un rango no asintótico, obteniéndose resultados satisfactorios. Ver la Fig. (2.1) donde se muestran los pesos α para $\Lambda \in (0, 1, 2, 3)$ en rango $t \in [1, 10]$.

En la Fig. (2.2) se muestra el comportamiento de las dos formas de cálculo comparadas con la expresión asintótica para Λ igual a 1 y a 5. Se observa que la integración con regla de Simpson comienza a oscilar para valores de t mucho más bajos que aquellos que hacen oscilar el cálculo recursivo. Esto se debe a que los errores de redondeo se multiplican en el cálculo recursivo mientras que en el integral tienden a cancelarse. Téngase presente, sin embargo, que llegado el caso puede utilizarse el cálculo integral para calcular el paso asintótico de un desarrollo espacial Λ elevado y utilizar la regla recursiva en forma inversa para obtener los pesos de Λ inferiores, en cuyo caso los errores de redondeo disminuyen.

En la Fig. (2.3) se grafican los valores más pequeños de t para los cuales los cálculos por Simpson o por regla recursiva no oscilan, que denominaremos t_{lim} . Es decir, por debajo del límite t_{lim} estas formas de cálculo no pueden ser utilizadas para obtener los coeficientes de peso. Afortunadamente, el cálculo integral "antes" de oscilar coincide con la expresión asintótica, por lo menos para $\Lambda < 14$.

Finalmente, se observó que la implementación de la integración por Simpson arroja valores indeterminados para $t > 800$ aproximadamente (porque la presente implementación supone la evaluación de exponenciales positivas). Por su parte, el cálculo recursivo se mantiene estable, como se grafica en la Fig. (2.4) tendiendo al límite analítico para t muy grandes. Por último notamos que la forma recursiva consume menos tiempo de cálculo que la regla de Simpson.

Por tanto, se concluye que para el cálculo correcto de los coeficientes de peso en todo el rango de t debemos

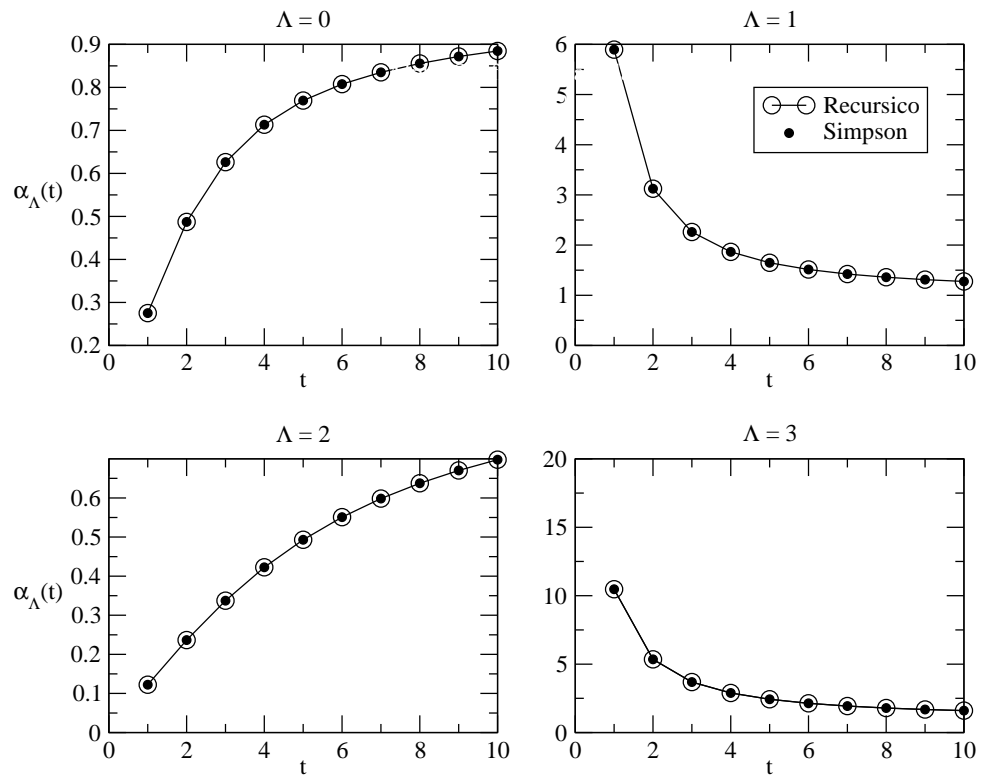


Figura 2.1: Coeficientes de peso en función del parámetro t para distintos órdenes de desarrollo espacial del flujo. Se comparan los cálculos Recursivos y integración de Simpson con 10000 pasos de integración en el rango $t \in [1, 10]$.

1. utilizar los coeficientes asintóticos por debajo de t_{lim} de la regla de Simpson
2. utilizar la regla de Simpson por debajo de t_{lim} de la regla Recursiva
3. utilizar la forma recursiva por encima de su t_{lim} .

Como ejemplo de esta implementación se muestra en la Fig. 2.5 el cálculo de coeficientes de peso para un problema de fotones y electrones acoplados en cobre. Específicamente, corresponde a un problema de 40 grupos de electrones, y 20 grupos de fotones con una cuadratura S_{16} y orden de desarrollo espacial lineal ($\Lambda = 1$). Se recuerda que los coeficientes de peso son calculados por dirección (8 direcciones por ser la cuadratura simétrica) y por celda (en este caso una única celda). Se observan algunos aspectos: los valores de t de electrones son elevados, especialmente para bajas energía, confirmando la necesidad de revisar los cálculos para $t > 800$; el amplio rango de valores de t que genera el hecho de acoplar partículas cargadas y neutras; en la gráfica se muestra la expresión de la aproximación asintótica en un amplio rango de t sólo por completitud.

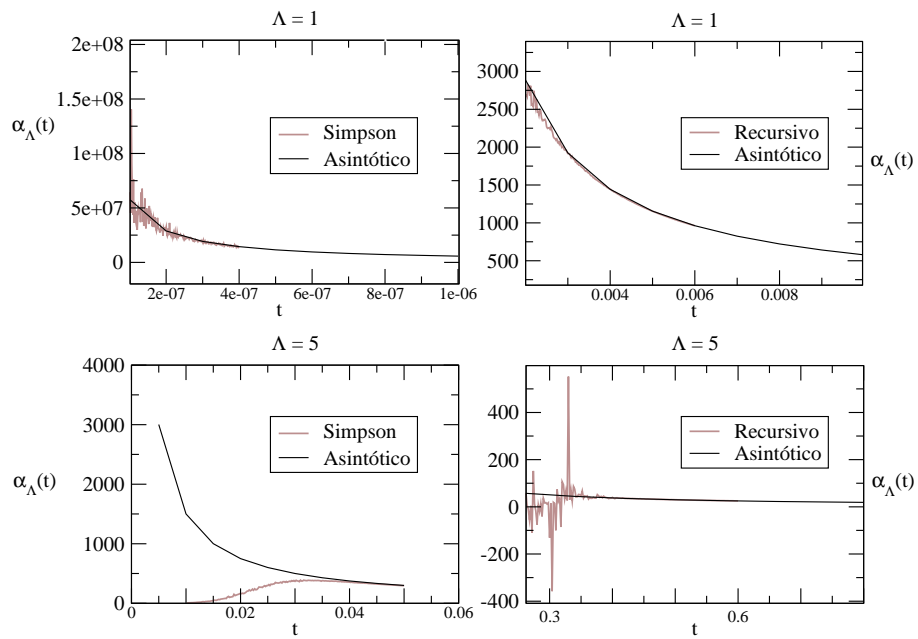


Figura 2.2: Coeficientes de peso en la región asintótica. Se grafica la zona de iniciación de las oscilaciones de los cálculos de Simpson y Recursivo. Se observa que la regla de Simpson resulta mucho más estable que el cálculo Recursivo.

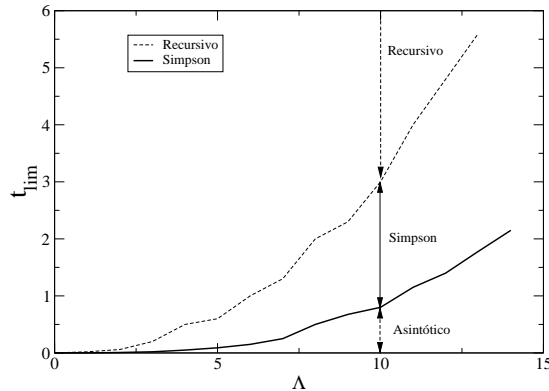


Figura 2.3: t_{lim} vs. Λ para el cálculo Recursivo y regla de Simpson. t_{lim} representa el límite por debajo del cual estas formas de cálculo no permiten obtener los coeficientes de peso α . Con flechas se indican los intervalos de validez de cada cálculo para $\Lambda = 10$.

Conclusión sobre los coeficientes de peso

A diferencia de partículas neutras, las partículas cargadas interactúan continuamente con la materia, de modo que sus caminos libres medios son mucho menores, especialmente a bajas energías. Esto apareja un consecuencia directa para los coeficientes de peso que dependen de la sección eficaz total (o la inversa del camino libre medio de la partícula). En particular, para la implementación de transporte acoplado, fue necesario la revisión de cálculo de coeficientes de peso para secciones eficaces elevadas. Por otro lado, nótese que para las partículas neutras de alta energía el uso de

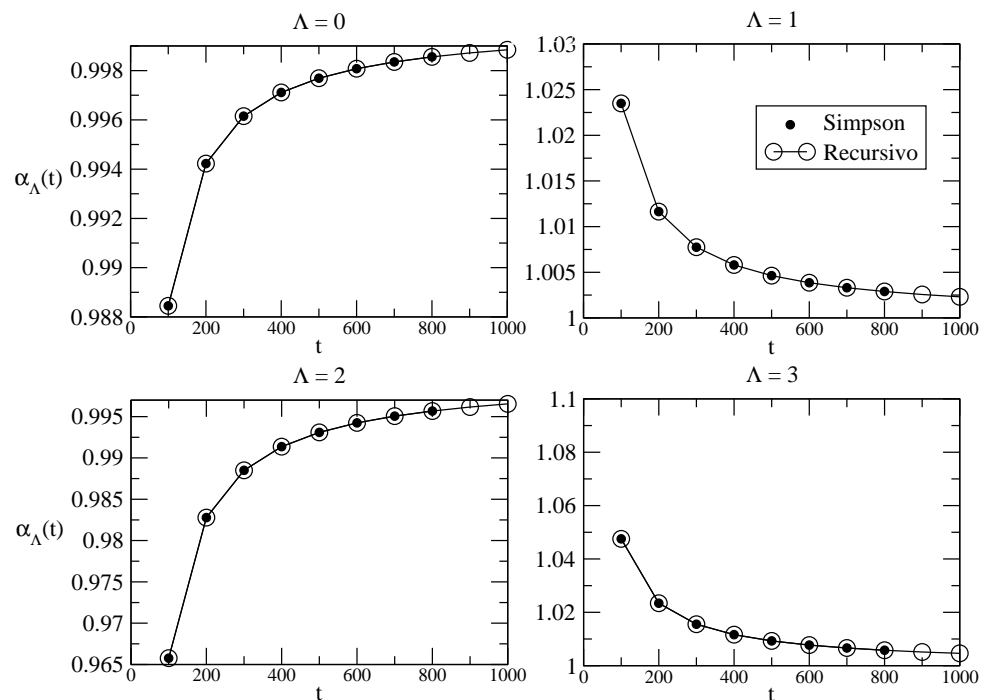


Figura 2.4: Coeficientes de peso para parámetro t elevado. La regla de Simpson arroja resultados indeterminados para $t > 800$. La regla Recursiva permite el cálculo de α aún para el límite $\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha = 1$.

expresiones de coeficientes asintóticos desarrolladas por Zamosnky y Azmy [4], son fundamentales para poder acoplar partículas de tan diferente grado de interacción con la materia.

La regla de integración recursiva supuso una mejora en los tiempos de cálculo de los coeficientes de peso. Dado que esta regla no alcanza la expresión asintótica, se ha debido conservar la integración numérica en un intervalo de la variable t . Con la revisión del cálculo se dejó al programa en condiciones de resolver problemas de partículas acopladas con caminos libres medios disímiles.

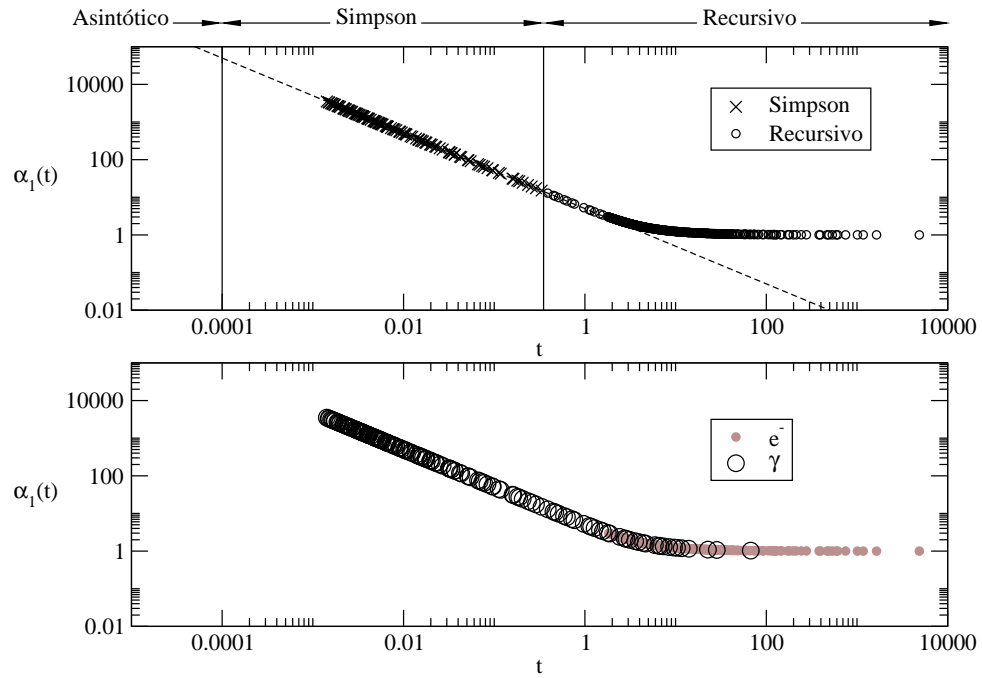


Figura 2.5: Coeficientes de peso para un cálculo de transporte acoplado de electrones y fotones en cobre. El caso pone en evidencia la amplitud de rangos de t para cálculos de partículas cargadas y neutras.

2.3.2. Reconstrucción del flujo

Los momentos de la solución del método AHOT permiten reconstruir puntualmente el flujo angular en todo punto x del sistema a través del desarrollo a orden Λ del flujo en cada dirección. Esta reconstrucción, que llamaremos $\tilde{\psi}$ (Ec. (2.20)), es discontinua en las interfaces.

$$\tilde{\psi}_m(x) = \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda + 1) \psi_m(\lambda, k) p_{\lambda}(x) \quad x_{k-1/2} < x < x_{k+1/2} \quad (2.20)$$

Por otra parte, utilizando los momentos mencionados es posible calcular los momentos de expansión de la fuente (a través del scattering), y de esta forma utilizar la integración espacial analítica para obtener otra reconstrucción del flujo, que llamaremos ψ . De ambas reconstrucciones puede decirse que, si bien $\tilde{\psi}$ es más sencilla de evaluar que ψ , esta última no solo es más precisa sino que es continua en todo x (Ec. (2.21))[45].

$$\psi_m(x) = \psi_m(x_{k-1/2}) e^{-\frac{\Sigma_t(x-x_k)}{\mu_m}} + \frac{1}{\mu_m} \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda+1) \psi_m(\lambda, k) \int_{x_{k-1/2}}^x dx' e^{-\frac{\Sigma_t(x-x')}{\mu_m}} p_{\lambda}(x') \quad (2.21)$$

Aunque ambas reconstrucciones han sido implementadas en el código, en capítulos siguientes al referirnos a valores reconstruidos significa que son obtenidos a través ψ . En

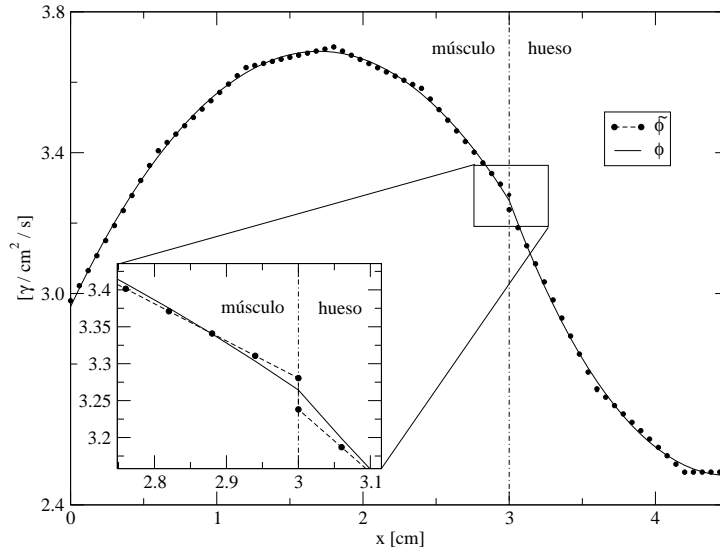


Figura 2.6: Flujos escalares reconstruidos para una fuente isotrópica de fotones de 511 KeV distribuida uniformemente en el músculo con condición de borde de reflexión en la cara derecha. $\tilde{\phi}$ es más fácil de evaluar pero ϕ es continua en x .

la Fig. 2.6 se grafica el flujo escalar a partir de los flujos reconstruidos para un problema de fuente de fotones de 511 keV isotrópica uniformemente distribuida en músculo en contacto con hueso. En la interface se destacan las propiedades de los flujos reconstruidos que mencionamos. Pero quizás la propiedad más importante es que permiten la construcción de un estimador de error a posteriori.

2.3.3. Estimador de error *a posteriori*

La obtención de las reconstrucciones mencionadas posibilita el cálculo de un estimador de error desarrollado por Azmy, Zamonsky y Buscaglia [5, 6, 7]. La expresión del indicador de error unidimensional puede escribirse como

$$\|\epsilon\|_{L^2}^2 = \sum_{k=1}^K \sum_{m=1}^N \eta_{mk}^2 + t.o.s. \quad (2.22)$$

donde

$$\eta_{mk}^2 = \frac{h_k^2}{2} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} dx' \left\{ \frac{1}{\mu_{m'}} \sum_{m'=1}^N \Sigma_{mm'} (\tilde{\psi}_{m'} - \psi_{m'})(x') + (\tilde{q}_m - q_m)(x') \right\} \quad (2.23)$$

donde hemos introducido

$$\tilde{q}_m(x) = \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda + 1) q_m(\lambda, k) p_{\lambda}(x) \quad x_{k-1/2} < x < x_{k+1/2}$$

que es la fuente externa truncada hasta orden Λ y la sección eficaz de dispersión de una dirección m' a otra m , $\Sigma_{mm'}$, que utilizando el teorema de adición de los armónicos

esféricos puede expresarse como

$$\Sigma_{mm'} = \sum_{l=0}^L \Sigma_{sl} P_l(\mu_m) P_l(\mu_{m'}) \quad (2.24)$$

Una propiedad muy deseable que posee este indicador de error global es que es una cota superior al error debido a la discretización espacial. De mayor interés que el indicador de error global son los indicadores *por celda*, ya que permiten identificar las celdas donde la solución numérica tiene mayor error. Estos se definen por

$$\eta_k^2 = \sum_{m'=1}^N \eta_{mk}^2 \quad (2.25)$$

En la Fig. 2.7 vemos que este indicador sigue el comportamiento del error real. Por error real nos referimos a la diferencia entre el cálculo del método y la solución analítica en la misma aproximación de ordenadas discretas (ver Apéndice A).

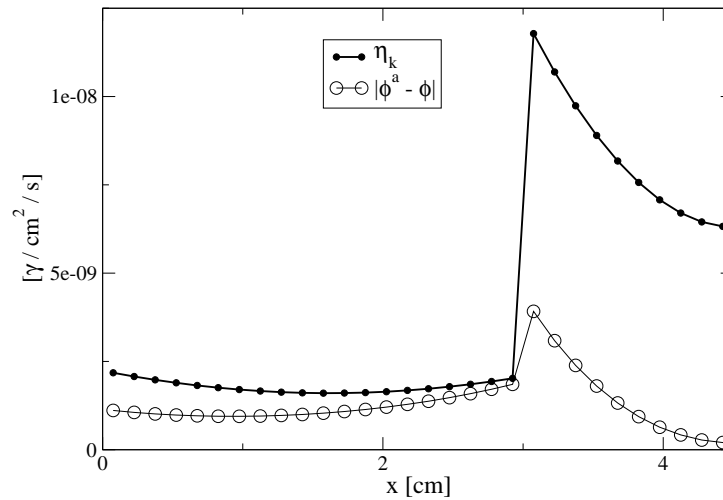


Figura 2.7: Estimador de error a posteriori para una fuente isotrópica de fotones de 511 KeV distribuida uniformemente en el músculo con condición de borde de reflexión en la cara derecha. El estimador de error local, siguiendo el comportamiento del error real, permite conocer qué celdas tienen mayor error.

El estimador de error dota al método AHOT-N de una herramienta valiosa para determinar la precisión del cálculo y para desarrollar técnicas adaptativas. En este trabajo, se utilizó el indicador de error para generar mallas refinadas localmente para poder resolver correctamente el flujo de electrones cerca de las interfaces del sistema.

El paso a seguir en esta línea de investigación es estudiar la utilización de este estimador para indicar cuál sería el orden de desarrollo espacial óptimo por grupo y/o por malla.

2.4. Aceleración Sintética S_2

La resolución de problemas multigrupo acoplados motivó la búsqueda de aceleraciones del método iterativo debido a que los tiempos de cálculo resultaban importantes comparados con otros códigos[19, 36]. Esto derivó en el estudio de aceleraciones sintéticas de difusión y la implementación en el código de una versión simplificada de la Aceleración Sintética S_2 propuesta por Larsen que presentamos a continuación [26].

Dejando de lado la discretización espacial y trabajando con la ecuación unidimensional monoenergética, las ecuaciones S_N puede expresarse como

$$\mu_m \frac{d\psi_m^{n+1}}{dx} + \Sigma_t \psi_m^{n+1} = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_m) \Sigma_s l(x) \phi_l^n + q_m \quad (2.26)$$

$$\phi_l^{n+1} = \sum_{m=1}^N w_m P_l(\mu_m) \psi_m^{n+1} \quad (2.27)$$

Las Ecuaciones (2.26) y (2.27) corresponden a las iteraciones estándares sobre la fuente: uno resuelve la Ec. (2.26) para la próxima iteración $n+1$ utilizando los momentos de la iteración anterior n . Si no hay aceleración esto completa una iteración. Se obtiene aceleración en la convergencia sumando correcciones a los dos primeros momentos angulares del flujo. La motivación de este esquema proviene del hecho de que la corrección exacta para el flujo angular en la iteración $n+1$ es

$$\epsilon_m = \psi_m^a - \psi_m^{n+1} \quad (2.28)$$

donde ψ_m^a es la solución analítica de las ecuaciones S_N . Ahora, si utilizamos las Ec. (2.26) y (2.27) para escribir la ecuación del error ϵ encontramos que

$$\mu_m \frac{d\epsilon_m}{dx} + \Sigma_t \epsilon_m = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_m) \Sigma_{sl} (\xi_l + \phi_l^{n+1} - \phi_l^n) \quad (2.29)$$

$$\xi_l = \sum_{m=1}^N w_m P_l(\mu_m) \epsilon_m \quad (2.30)$$

Haciendo la aproximación estándar P_1 tenemos

$$\epsilon_m = \frac{1}{2} (c_0 + 3\mu_m c_1) \quad (2.31)$$

Si ahora se toma el momento angular cero y uno de la Ec. (2.30) usando la cuadratura S_N obtenemos la ecuación de balance escalar y la ecuación del primer momento

$$\frac{dc_0}{dx} + (\Sigma_t - \Sigma_{s0}) c_0 = \Sigma_{s0} (\phi_0^{n+1} - \phi_0^n) \quad (2.32)$$

$$\frac{1}{3} \frac{dc_1}{dx} + (\Sigma_t - \Sigma_{s1}) c_1 = \Sigma_{s1} (\phi_1^{n+1} - \phi_1^n) \quad (2.33)$$

La Ecuación (2.33) se puede reescribir teniendo en cuenta la siguiente y transformación

$$c_+ = \frac{1}{2}(c_0 + \mu_+ c_1) \quad (2.34)$$

$$c_- = \frac{1}{2}(c_0 + \mu_- c_1) \quad (2.35)$$

donde $\mu_+ = 1/\sqrt{3}$ y $\mu_- = -1/\sqrt{3}$. Reescribiendo obtenemos

$$\begin{aligned} \mu_+ \frac{dc_+}{dx} + \Sigma_t c_+ &= \sum_{l=0}^1 (2l+1) P_l(\mu_+) \Sigma_{sl} (c_l + \phi_l^{n+1} - \phi_l^n) \\ \mu_- \frac{dc_-}{dx} + \Sigma_t c_- &= \sum_{l=0}^1 (2l+1) P_l(\mu_-) \Sigma_{sl} (c_l + \phi_l^{n+1} - \phi_l^n) \end{aligned} \quad (2.36)$$

El esquema de aceleración queda definido cuando utilizamos c_0 y c_1 para corregir los primeros dos momentos angulares ϕ_0^{n+1} y ϕ_1^{n+1} . Para ello introducimos un cambio de nomenclatura. El flujo de la iteración $n+1$ del esquema no acelerado pasa a ser la variable de un paso intermedio en la iteración interna acelerada

$$\psi_m^{n+1/2} \leftarrow \psi_m^{n+1} \quad (2.37)$$

$$\phi_l^{n+1/2} \leftarrow \phi_l^{n+1} \quad (2.38)$$

Con esta nueva nomenclatura los momentos angulares de la próxima iteración interna acelerada están dados por

$$\phi_l^{n+1} = \phi_l^{n+1/2} + c_l, \quad l = 0, 1 \quad (2.39)$$

$$\phi_l^{n+1} = \phi_l^{n+1/2}, \quad l = 2, L \quad (2.40)$$

Obsérvese que solo se aceleran los primeros dos momentos. Según Morel este esquema puede provocar que los flujos se hagan negativos y propone re-escalar los momentos superiores según

$$\phi_l^{n+1} = \phi_l^{n+1/2} \frac{\phi_l^{n+1}}{\phi_l^n}, \quad l = 2, L \quad (2.41)$$

Con ℓ igual a 0 (flujos escalares) o 1. Larsen, por su parte, indica que este esquema tiene la desventaja de ser no lineal. Nosotros encontramos que cualquiera de los esquemas de re-escalo desestabiliza el cálculo. Por otro lado, el esquema lineal resulta estable y aumenta la eficiencia del cálculo como se muestra en la próxima sección.

Resumiendo las ecuaciones completas que definen una iteración interna acelerada se escriben como

$$\mu_m \frac{d\psi_m^{n+1/2}}{dx} + \Sigma_t \psi_m^{n+1/2} = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_m) \Sigma_{sl}(x) \phi_l^n + q_m \quad (2.42)$$

$$\phi_l^{n+1/2} = \sum_{m=1}^N w_m P_l(\mu_m) \psi_m^{n+1/2} \quad (2.43)$$

$$\mu_+ \frac{dc_+^{n+1/2}}{dx} + \Sigma_t c_+^{n+1/2} = \sum_{l=0}^1 (2l+1) P_l(\mu_+) \Sigma_{sl} c_l^{n+1/2} + R_+ \quad (2.44)$$

$$\mu_- \frac{dc_-^{n+1/2}}{dx} + \Sigma_t c_-^{n+1/2} = \sum_{l=0}^1 (2l+1) P_l(\mu_-) \Sigma_{sl} c_l^{n+1/2} + R_+ \quad (2.45)$$

$$\phi_l^{n+1} = \phi_l^{n+1/2} + c_l^{n+1/2}, \quad l = 0, 1 \quad (2.46)$$

$$\phi_l^{n+1} = \phi_l^{n+1/2} + c_l^{n+1/2}, \quad l = 2, L \quad (2.47)$$

donde

$$R_+ = \Sigma_s 0 [\phi_0^{n+1/2} - \phi_0^n] + 3\mu_+ \Sigma_{s1} [\phi_1^{n+1/2} - \phi_1^n]$$

$$R_- = \Sigma_s 0 [\phi_0^{n+1/2} - \phi_0^n] + 3\mu_- \Sigma_{s1} [\phi_1^{n+1/2} - \phi_1^n]$$

La simplificación de nuestra implementación respecto de la versión de Larsen está relacionada con la forma de fijar las condiciones de contorno, los “flujos de error” entrantes de la Ec. (2.36). En nuestra implementación, para el caso de condiciones de contorno de flujo entrante o vacío, se supuso que c_+ y c_- entrantes son nulos. Larsen pide que el flujo acelerado “cumpla” la condición de contorno. Dado que existen más condiciones mientras $N > 2$, reduce la indeterminación sumando todas las condiciones de modo de obtener una condición *integral* dada, para el caso particular condición de contorno de vacío en el borde izquierdo del slab, por

$$\sum_{\mu_m > 0} \psi_m^{n+1} = 0 \quad (2.48)$$

$$\sum_{\mu_m > 0} \left(\psi_m^{n+1/2} + \frac{c_0}{2} + \frac{3c_1}{2} \mu_m \right) \mu_m w_m = 0 \quad (2.49)$$

Se probó esta última condición de contorno pero al no obtener resultados más satisfactorios que nuestra forma simplificada no se adoptó. Además, nuestra versión, en el caso que el cálculo sea S_2 , se reduce automáticamente a la ecuación del error.

Nosotros observamos en los casos corridos que la Ec. (2.49) se satisface a medida que el cálculo converge y en nuestra implementación encontramos útil no requerir la convergencia de la Ec. (2.36), sino simplemente buscar el efecto deseado de la aceleración: que “inyecte” partículas espacialmente donde la extrapolación de la fuente, R_{\pm} , lo indica.

A pesar de que utilizamos una versión simplificada de aceleración, hemos observado que aumenta la eficiencia del cálculo, especialmente en casos de baja convergencia y por ello la hemos adoptado.

Recuérdese que en esta sección se omitió el tratamiento espacial de las variables, pero el mismo se lleva a cabo en forma análoga al expuesto en la Sección 2.3.

2.4.1. Sobre la Convergencia

Se observa que la aceleración, en general, mejora la convergencia y para casos con orden bajo y muchas mallas reduce significativamente los tiempos de cálculo. Estas mejoras pueden reducir hasta un 50 % el tiempo de cálculo. En la Fig. 2.8 observamos el efecto de reducción del número de iteraciones interiores para un caso monoenergético de electrones de 70 keV incidiendo en slabs de cobre de distintos espesores.

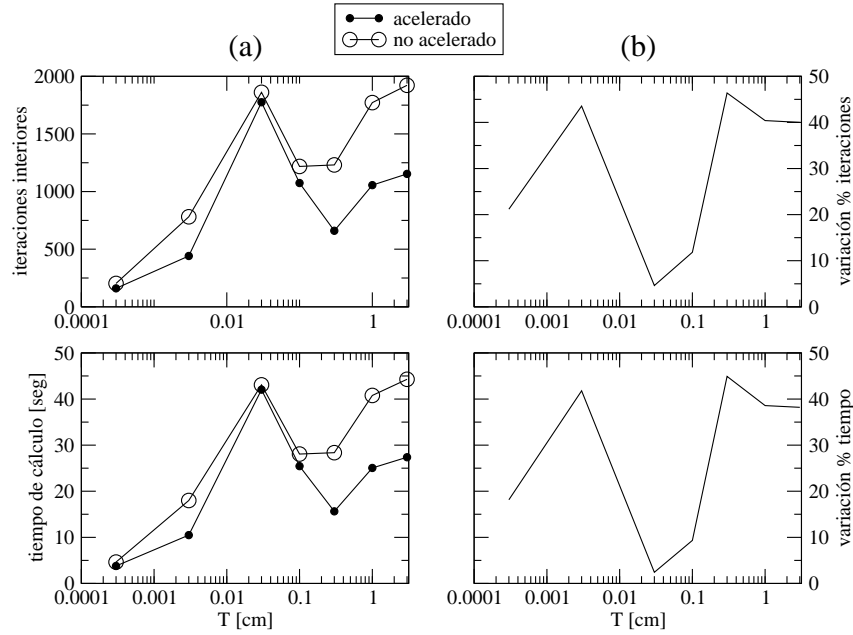


Figura 2.8: Aumento de eficiencia aplicando aceleración a un problemas de convergencia lenta. En la Fig.(a) se registra el número de iteraciones interiores y el tiempo de cálculo de un problema monoenergético en función del espesor del slab. En la Fig.(b) se muestra la variación porcentual de las iteraciones y el tiempo al utilizar la aceleración.

En la Fig. 2.9 se muestra el error relativo del flujo entre la iteración externa n -ésima y la siguiente. Se puede apreciar que la utilización de la aceleración tiene un efecto similar a requerir un orden de convergencia superior para las iteraciones internas. Sin embargo, requerir mayor convergencia interna aumenta las iteraciones internas por lo que el tiempo de cálculo no se reduce. En el código se han implementado dos opciones para minimizar el tiempo de cálculo: por un lado utilizar la aceleración sintética para disminuir la iteraciones interiores y por otro requerir un criterio de convergencia más relajado para la iteraciones exteriores según lo propone el código ONEDANT [36].

$$\varepsilon_{ext} = \varepsilon_{in} (1 + Ge^{-100 \varepsilon_{in}}) \quad (2.50)$$

donde

$$\frac{|\phi_{g\lambda k}^{n+1} - \phi_{g\lambda k}^n|}{|\phi_{g\lambda k}^{n+1}|} < \varepsilon_{in} \quad \frac{|\phi_{g\lambda k}^{n+1} - \phi_{g\lambda k}^n|}{|\phi_{g\lambda k}^{n+1}|} < \varepsilon_{out}$$

son los criterio de convergencia para el error relativo de todos los momentos espaciales λ del flujo escalar en cada micromalla k para las iteraciones interiores y exteriores respectivamente.

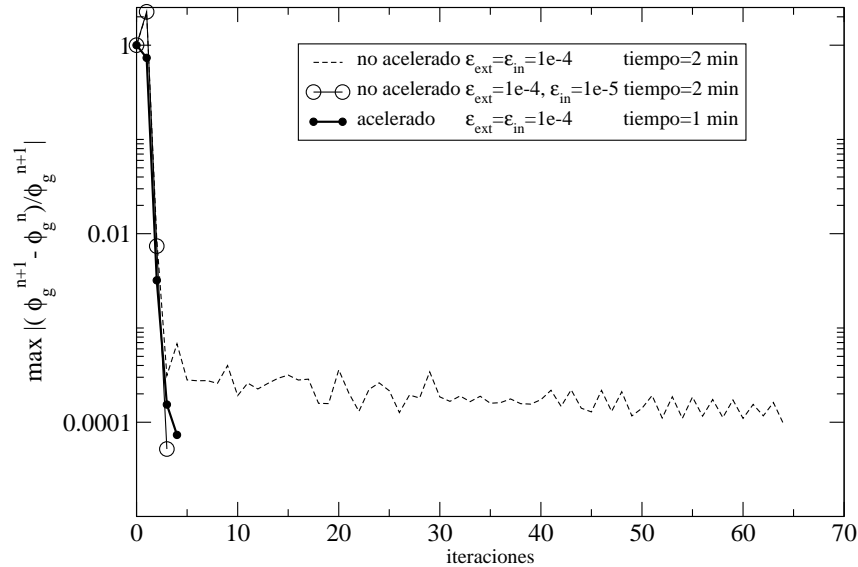


Figura 2.9: Aumentar el criterio de convergencia interno disminuye las iteraciones exteriores pero no disminuye el tiempo. La aceleración disminuye las iteraciones exteriores y el tiempo.

En la primera iteración exterior de problemas multigrupo con una única partícula con upscattering o de múltiples partículas no es necesario obtener una alta convergencia de los flujos dentro de cada grupo, porque las fuentes provenientes de otros grupos no han alcanzado todavía valores correctos. Por eso, en esta iteración se relaja un orden más la convergencia.

Por último, se incursionó en el reordenamiento del cálculo de los grupos para acelerar la convergencia. Se utilizó el hecho físico de que no existe up-scattering en los problemas de fotones y electrones para generar una estructura “paralela” de grupos entre fotones y electrones, de modo que todas las partículas tienen los mismos intervalos de energía. Con esta estructura es posible resolver el primer “grupo energético” para las dos partículas. Luego, el segundo con la fuente ya convergida del primero. Visto así, el sistema es triangular inferior, de modo que sólo requiere un barrido de estos “grupos energéticos”. Este esquema tiene la ventaja de converger en menos iteraciones exteriores pero restringe la libertad del usuario de seleccionar la grilla de grupos para cada partícula por separado.

2.5. Conclusiones

En este capítulo se ha presentado el método nodal como originalmente se desarrolló para partículas neutras. En particular, se enfatizó el hecho de que el método numérico es generalizable a múltiples dimensiones en geometría cartesiana a través del Método Nodal Transverso.

Durante la evolución de este trabajo las peculiaridades de los cálculos acoplados motivaron la revisión de los coeficientes de peso y la introducción de un esquema de aceleración que mejoraron la eficiencia del cálculo. Por otro lado, el estimador de error a posteriori desarrollado por los autores del método provee de una herramienta valiosa para cálculos adaptativos y se utilizó con éxito para generar mallas refinadas localmente.

Capítulo 3

Modelo Determinístico de Transporte Acoplado

En este capítulo se explican las aproximaciones que se realizan para poder representar la interacción de electrones y positrones con la materia, de modo de obtener secciones eficaces utilizables en códigos estándares de ordenadas discretas. Éstos se caracterizan por la representación del núcleo de dispersión en polinomios de Legendre.

3.1. Método de Cálculo Determinístico

Para el cálculo acoplado de electrones, positrones y fotones, hay tres ecuaciones de Boltzmann como la Ec.(2.1), una para cada tipo de partícula. La fuente de scattering no solo incluye las fuentes debido a scattering del mismo tipo de partículas, sino también aquellas interacciones donde una partícula produce otra, como la producción de fotones por interacciones radiativas de electrones o la producción de electrones por efecto fotoeléctrico, Compton o producción de pares. Despreciando la dependencia espacial de las secciones eficaces, la fuente de scattering puede ser expresada como

$$Q^i(x, E, \mu) = \sum_j 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma^{j \rightarrow i}(E' \rightarrow E, \mu_0) \psi^j(x, E', \mu') \quad (3.1)$$

donde $\Sigma^{j \rightarrow i}(E' \rightarrow E, \mu_0)$ es la sección eficaz diferencial de una partícula j con energía E' para producir una i , con energía E viajando en la dirección con coseno μ_0 respecto de la dirección de la partícula incidente. En cálculo de transporte de fotones, el núcleo de scattering se representa normalmente por una expansión finita en polinomios de Legendre en términos de μ_0 , dado que un orden bajo es suficiente para describir la dependencia angular. Sin embargo, éste no es el caso para colisiones de electrones "soft", donde el núcleo es extremadamente deltiforme alrededor de $E' = E$ y $\mu_0 = 1$. Para este caso, la sección eficaz macroscópica tiene un valor muy elevado para pérdidas de energía muy pequeñas y pequeñas deflexiones, de modo que el camino libre medio se acerca a cero y los electrones interactúan en forma continua. Dado que este comportamiento es cualitativamente diferente respecto de las otras interacciones,

es conveniente separar el núcleo que describe las interacciones “soft” del resto. Reemplazando $e \equiv i$ en la Ec. (3.1) se obtiene

$$\begin{aligned}
 Q^e(x, E, \mu) = & 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma^{e \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0) \psi^e(x, E', \mu') \\
 & + \sum_{j \neq e} 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma^{j \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0) \psi^j(x, E', \mu') \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

El primer término de la fuente de scattering se descompone en (a) un núcleo de scattering deltiforme para las colisiones inelásticas “soft” (de colisión y radiativas), indicado por $\widehat{\Sigma}^{e \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0)$ y (b) el resto del núcleo describiendo producción de electrones secundarios, indicado por $\widetilde{\Sigma}^{e \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0)$. Un procedimiento similar se aplica a positrones. La aproximación de Fokker-Plank(FP) se puede aplicar al término (a). En FP el núcleo de scattering deltiforme se expande en serie de Taylor alrededor de $E' = E$ y $\mu_0 = 1$ truncada a primer o segundo orden. Esto convierte el operador integral en un operador diferencial que contiene derivadas con respecto a la energía y la coordenada angular [33]. La aproximación de moderación continua (CSD) es una aproximación del operador de FP en la cual los términos de derivadas angulares son ignorados, implicando que los electrones pierden energía continuamente sin cambiar de dirección. Esto es equivalente a suponer que el núcleo de scattering puede ser aproximado por $\widehat{\Sigma}(E' \rightarrow E, \mu_0) = \widetilde{\Sigma}(E' \rightarrow E) \delta(\mu_0 - 1)$. Si se aplica la aproximación CSD a la Ec. (3.2), se obtiene la siguiente expresión para la fuente de scattering de electrones

$$\begin{aligned}
 Q^e(x, E, \mu) = & \frac{\partial}{\partial E} [R^c(E) \psi^e(x, E, \mu)] + \frac{\partial}{\partial E} [R^r(E) \psi^e(x, E, \mu)] + \\
 & 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \widetilde{\Sigma}^{e \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0) \psi^e(x, E', \mu') + \\
 & \sum_{j \neq e} 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma^{j \rightarrow e}(E' \rightarrow E, \mu_0) \psi^j(x, E', \mu') \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

donde R^c y R^r son los poderes de frenamiento restringidos colisional y radiativo respectivamente (MeV/cm). Sólo interacciones inelásticas que resultan en una pérdida de energía menor que una cantidad especificada (Ver Sección 3.2.2) son “soft” y tratadas con la aproximación CSD. Todas las otras son consideradas *catastróficas*. Las reacciones catastróficas son representadas explícitamente con un núcleo expandido en polinomios de Legendre. Éstas incluyen scattering inelástico que produce electrones “knock-on” y reacciones radiativas catastróficas que producen radiación de frenamiento.

3.2. Secciones Eficaces

Para generar los parámetros de transporte se utiliza el código de secciones eficaces CEPXS (Couple Electron Photon Cross Sections) [14]. Este código permite obtener secciones eficaces para cálculos de transporte de fotones, electrones y positrones acoplados para ser utilizadas por un código de ordenadas discretas en la aproximación multigrupo. La dependencia angular se representa con una expansión en serie de Legendre. Éstas permiten resolver problemas para electrones y fotones en rango de energías de 100 MeV a 1 keV. A continuación se nombran los modelos físicos y algunas de las aproximaciones utilizadas por el código CEPXS para el cálculo de las bibliotecas.

3.2.1. Modelos físicos

Esta sección tiene por objeto presentar cuáles son los modelos físicos tenidos en cuenta en la generación de secciones eficaces por el código CEPXS. Es importante recordar que la precisión de los cálculos no puede ser mejor que las aproximaciones físicas y los datos nucleares. Estos modelos, salvo algunas simplificaciones, tienen en cuenta los principales mecanismos de interacción y son equivalentes a los modelos que utilizan los códigos estocásticos como ITS y MCNP [22, 31].

Las colisiones inelásticas catastróficas y la producción de electrones “knock-on” son modeladas por la sección eficaz microscópica de Moller. Las colisiones “soft” o débiles son modeladas por un operador de moderación continua restringido (CSD) cuya derivación se detalla en la Sección 3.2.2. Acotamos aquí que para el cálculo de dicho operador se utilizan datos de poder de frenamiento modelados por la teoría de Bethe [23]. A este modelo se agregan una extrapolación *ad hoc* por debajo de 10 keV y un factor de corrección por efecto de densidad debido a Sternheimer [41]. La sección eficaz de producción de Bremsstrahlung se representa en CEPXS por una sección eficaz diferencial en energía obtenida por Berger y Seltzer [9] y una distribución angular normalizada debida a Sommerfield [38] que se evalúa a la energía media de cada grupo. Desde el punto de vista del electrón incidente, las dispersiones radiativas catastróficas se modelan sin deflexión angular y las dispersiones radiativas “soft” se modelan con el operador CSD en forma análoga a las colisiones inelásticas catastróficas, pero utilizando el poder de frenamiento radiativo en este caso [23].

La dispersión elástica de electrones relativistas se modela con la sección eficaz de Mott con “screening” de Molière [8]. Para electrones con energías inferiores ($E < 256$ keV) CEPXS utiliza secciones eficaces derivadas por Riley et al. [37]. Para permitir una expansión de Legendre de bajo orden satisfactoria, se utiliza la corrección de transporte extendida para la dispersión elástica [32].

La sección eficaz de Gryzinski [21] se utiliza para las ionizaciones de todas las capas con energías de ligadura superiores a la energía de corte. También existe la opción de sólo tener en cuenta la ionización de la capa k con la sección eficaz derivada por Kolbenstvedt [25]. Siguiendo una ionización, se modela la cascada de relajación que consiste en electrones Auger y fotones fluorescentes.

La sección eficaz de Klein-Nishina se usa para representar la dispersión incoherente de fotones con electrones atómicos y la producción de electrones Compton [30]. Se ig-

nora el scattering coherente. CEPXS utiliza la formulación de Biggs-Lighthill [12] para la sección eficaz de absorción por efecto fotoeléctrico y la producción de fotoelectrones. Para los fotoelectrones de baja energía se utiliza la distribución angular de Fischer [15]. Para energías superiores se usa la distribución de Sauter [15]. La misma formulación de Biggs-Lighthill se utiliza para la sección eficaz de creación de pares. Dado que la producción de pares y la generación de radiación de frenamiento son procesos inversos se utiliza la misma distribución angular de Sommerfeld para el electrón saliente.

Las mismas secciones eficaces elásticas e inelásticas que se usan para electrones se usan para los positrones. No se usan secciones eficaces específicas para positrones (ej. la sección eficaz inelástica de Bhabha [11]). Pero sí se tiene en cuenta la aniquilación de los positrones cuando su energía cae por debajo de la energía de corte, en cuyo caso se producen dos cuantos de 511 keV emitidos isotrópicamente.

Por tanto, los datos nucleares incluidos en el cálculo de las secciones eficaces tienen en cuenta las principales formas de interacción de las partículas con la materia. Salvo por un tratamiento simplificado de la generación de radiación de frenamiento y por tratar los positrones como “electrones aniquilables”, podemos afirmar que el modelo físico es similar al código de generación de secciones eficaces XSGEN de la serie ITS. Además, el código MCNP contiene datos nucleares equivalentes a los de ITS. Por transitividad, decimos que MCNP y CEPXS tiene datos similares.

3.2.2. Operador de moderación continua restringido

La definición de colisiones “soft” depende de la estructura multigrupo. En una colisión débil, el electrón aparece en el grupo adyacente al grupo asociado al electrón incidente. Dado que es imposible modelar estas secciones eficaces con un número razonable de momentos angulares, CEPXS utiliza la aproximación CSD [33, 34]. Nótese que este operador no modela el straggling energético asociado a este tipo de colisiones. Los coeficientes de la expansión angular de la matriz de transferencia asociada con la forma de primer orden del operador restringido de frenamiento continuo (CSD1) son:

$$\Sigma_{g \rightarrow g+1, l}^c = \frac{R^c(E_g^m)}{E_g^m - E_{g+1}^m} \quad (3.4)$$

donde

R^c Poder de frenamiento restringido de colisión

E_g^m Energía media del grupo g

$l = 0, \dots, L$ momentos de expansión en polinomios de Legendre

En una colisión débil, se supone que los electrones se moderan sin deflexión angular. La distribución angular asociada a las secciones eficaces del operador CSD es la función delta de Kronecker truncada al máximo orden angular L computado en el cálculo. En un código de ordenadas discretas tal representación causaría dispersión numérica de las partículas, a menos que se usen cuadraturas angulares de Gauss o Galerkin de orden $L + 1$.

Morel [35] deduce que, eligiendo convenientemente los valores de las secciones eficaces, el operador de Boltzmann es equivalente al operador de Fokker-Planck (el operador CSD) cuando operan sobre un polinomio de orden L . Además, muestra que la formulación en armónicos esféricos unidimensional (con condiciones de borde de Mark) es equivalente a la formulación de ordenadas discretas, con tal que la cuadratura utilizada permita integrar exactamente la fuente de scattering. Pero dado que el núcleo de dispersión corresponde a una delta angular, esto sólo se puede lograr si el operador que construye los momentos angulares a partir de los flujos angulares discretos (\mathbf{D}), compuesto con el operador que construye la fuente de dispersión a partir de los momentos angulares ($\mathbf{M}\Sigma$), resulte ser la identidad por el valor de la delta. Para que se cumpla esta condición en el caso de cuadraturas gaussianas supone conocer N momentos angulares. Escrito en forma de operadores y vectores, los momentos angulares se calculan según

$$\underline{\phi} = \mathbf{D}\underline{\psi}$$

y la fuente de dispersión queda expresada por

$$\underline{Q} = \mathbf{M}\Sigma\mathbf{D}\underline{\psi}$$

en el caso del operador CSD la matriz de secciones eficaces se reduce a una matriz diagonal, como indica la Ec.(3.4) para el caso de interacciones colisionales

$$\Sigma = \text{diag}(\hat{\Sigma}, \hat{\Sigma}, \dots, \hat{\Sigma})$$

La condición de integrabilidad de la delta se satisface si

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}^{-1}$$

Entonces el núcleo de scattering deltiforme queda integrado exactamente, pues

$$\begin{aligned} \underline{Q} &= \mathbf{M}\Sigma\mathbf{D}\underline{\psi} = \mathbf{D}^{-1}\hat{\Sigma}\mathbf{D}\underline{\psi} = \hat{\Sigma}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{D}\underline{\psi} \\ \underline{Q} &= \hat{\Sigma}\underline{\psi} \end{aligned} \quad (3.5)$$

En otras palabras, si conservamos suficientes momentos generados por la cuadratura como para poder recalcular los flujos angulares, los núcleos de scattering deltiforme quedan representados exactamente.

Los coeficientes de la expansión angular asociados a la forma de segundo orden (diferencias pesadas) del operador de moderación continua restringido (CSD2) son:

$$\Sigma_{g \rightarrow g', l}^c = \frac{(-1)^{g' - g + 1}}{\Delta E_g} 2[R^c(E_{g'}) + R^c(E_{g'+1})] \quad \text{si } g < g' < G \quad (3.6)$$

$$= \frac{(-1)^{G - g + 1}}{\Delta E_g} 2[R^c(E_G) + R^c(E_{G+1})] \quad \text{si } g' = G \quad (3.7)$$

$$= 0 \quad \text{de otro modo} \quad (3.8)$$

Nótese que las secciones eficaces del operador CSD de segundo orden pueden ser negativas. Esto es posible ya que no tiene contrapartida física a nivel microscópico. La no positividad de estas secciones eficaces será la responsable de las oscilaciones energéticas y espaciales que pueden presentar los flujos.

3.2.3. El poder de frenamiento restringido

El poder de frenamiento restringido se define según [18]

$$R^c(E) = \int_E^{E+\delta E} dE' \hat{\Sigma}(E' \rightarrow E)(E - E') \quad (3.9)$$

donde δE es el límite artificial entre las interacciones “soft” y “catastróficas”. En los cálculos multigrupo, este límite queda definido por la grilla energética, ya que los electrones se moderan continuamente sólo al grupo energético inferior. Para poder calcularlo se observa que el poder de frenamiento restringido es aquella parte del poder de frenamiento que no se debe a colisiones catastróficas. Luego, a partir de datos de poder de frenamiento colisional y sección eficaz de Moller se expresa como [34]

$$R^c(E_g^m) = S^c(E_g^m) - \frac{m_e c^2}{\Delta T_g} \int_{T_{g+1}}^{T_g} dT \int_{T/2}^{T_{g+2}} dT' H(\Delta T')(T - T') \frac{d\sigma^c(T, T')}{dT'} \quad (3.10)$$

donde

S^c	poder de frenamiento colisional
T	energía cinética del electrón
σ^c	sección eficaz diferencial de Moller
E_g^m	energía media del grupo g
m_e	masa del electrón
c	velocidad de la luz
H	función escalón o de Heaviside

Este esquema combinado de frenamiento continuo y colisiones catastróficas es análogo al esquema que utilizan, para el tratamiento de las partículas cargadas, los códigos estocásticos que comparamos a continuación.

3.3. Cálculos Estocásticos vs. Determinísticos

Tanto los métodos estocástico como determinístico pueden utilizarse para predecir el transporte de partículas. En el método estocástico las trayectorias de las partículas son modeladas probabilísticamente. Ambos métodos presentan ventajas y desventajas. La ventaja más significativa de los métodos de ordenadas discretas (OD) es su eficiencia. La desventaja, por su parte, es que el mallado de la energía, las direcciones y el espacio traen aparejado errores de discretización. En principio, el método Monte Carlo análogo permite calcular el transporte de partículas neutras sin estos errores. Pero al tratar partículas cargadas, la simulación directa de los procesos físicos de dispersión sería laboriosa debido al gran número de interacciones coulombianas que sufren los electrones. Se usa, alternativamente, otro método en el cual el proceso de difusión es imitado, dejando que la partícula lleve a cabo “pasos” randómicos, en cada uno de

los cuales se tiene en cuenta el efecto combinado de muchas colisiones. En este sentido, la teoría de múltiple scattering que da origen al modelo de historias condensadas [8] contiene intrínsecamente errores de discretización.

Por otro lado, el método Monte Carlo resulta particularmente ineficiente para problemas de blindajes con espesores de muchos caminos libres medios. Es decir, para eventos de baja probabilidad que requieren un alto número de “historias” de partículas, obtener soluciones precisas incrementa significativamente el costo computacional. Se pueden utilizar técnicas de reducción de varianza, pero con precaución, pues puede conducir a resultados no físicos.

Existen otras diferencias entre los métodos. Los códigos OD utilizan más memoria que los códigos Monte Carlo. Por su parte, los cálculos estocásticos resultan naturalmente paralelizables y pueden tratar algunas geometrías tridimensionales con relativa facilidad. Otra desventaja del método OD es que no se puede computar cantidades correlacionadas sino sólo cantidades promedio.

En este trabajo, se utilizó el código MCNP [31] con el fin de generar soluciones “benchmark” para algunos problemas. Sin embargo, la discrepancia que presentaron estos resultados respecto de publicaciones de cálculos similares con ITS [22], finalizó en una discusión acerca de los tipos de interpolación sobre los datos de secciones eficaces que puede realizar el código MCNP. Estas interpolaciones se denominan indexaciones energéticas.

3.3.1. Indexación energética

En el esquema de historias condensadas utilizado por MCNP e ITS, los “pasos” de los electrones se definen en función de pérdidas energéticas predeterminadas. El espaciado logarítmico de los “saltos” energéticos ($E_{g+1} = k E_g$) que usualmente se utiliza, presenta la ventaja de que la deflexión angular media del scattering múltiple cambia poco de paso a paso. Pero, debido al straggling energético, la producción de bremsstrahlung y la interrupción de los tracks en los interfaces de celda, la secuencia energética de los electrones se desvía de la secuencia energética impuesta. Entonces, los datos de transporte precalculados en estos intervalos energéticos se asignan a cada electrón, de modo que aunque no corresponden exactamente a la energía en cada caso individual, en promedio tiendan al valor correcto.

El código MCNP permite hacer dos tipos de indexaciones energéticas (“energy indexing”). En la indexación default del código, que llamaremos indexación MCNP, los datos de secciones eficaces y poder de frenamiento que se le asignan a cada electrón son los correspondientes al intervalo energético en el que se encuentra el electrón. Por el contrario, si se utiliza la indexación que llamaremos ITS (por ser la que utiliza ese código), los valores asignados corresponden al intervalo energético cuya energía superior es la más cercana a la energía del electrón. Dado que los parámetros de transporte son calculados en el límite superior de cada grupo energético, la indexación MCNP corresponde a un electrón que está, en promedio, desplazado medio grupo más arriba en la grilla energética [39][24].

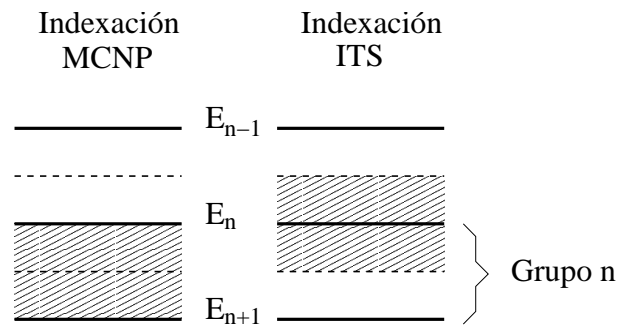


Figura 3.1: Indexación Energética del código MCNP. El diagrama esquematiza las dos formas de interpolación de datos de secciones eficaces. A los electrones con energías en la zona rayada se les asigna los parámetros de transporte a la energía E_n . ($E_n > E_{n+1}$).

3.4. Conclusiones

Las secciones eficaces utilizadas permiten modelar los principales fenómenos de interacción de las partículas con la materia tanto en MCNP como en CEPXS. Las diferencias más importantes en los resultados se deberán, por el lado de CEPXS, a la convergencia energética del operador de moderación continua que depende directamente de la discretización energética. Por el lado de MCNP, las discrepancias se deberán al tipo de indexación energética y al artefacto numérico que introducen las interfaces de celda en el algoritmo de transporte de electrones.

Capítulo 4

Implementación y Validación

4.1. Implementación

En esta sección se describen algunos aspectos de la implementación del código AHOT desarrollado en este trabajo. El punto de partida para dicho desarrollo fue un programa para la resolución de la ecuación de transporte de Boltzmann unidimensional bajo la aproximación de Ordenadas Discretas, S_N , monoenergético, con fuente y scattering isotrópicos. El código implementado tiene las siguientes características:

- Resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann en geometría cartesiana unidimensional con la aproximación angular de ordenadas discretas, S_N .
- Utiliza un esquema multigrupo para el tratamiento energético.
- Admite scattering anisotrópico de orden general, es decir, secciones eficaces de scattering hasta cualquier orden L de una expansión en polinomios de Legendre.
- El tratamiento espacial se realiza con el método nodal de orden arbitrario, donde cada grupo energético puede tener distinto orden de desarrollo.
- Las iteraciones interiores pueden ser aceleradas mediante un esquema de aceleración sintética S_2 .
- En un grupo energético predeterminado por el usuario puede realizarse una estimación de errores *a posteriori*.
- AHOT admite condiciones de contorno de vacío y de reflexión especular en ambas fronteras del sistema.
- Es posible introducir condiciones de contorno de fuente volumétrica isotrópica fija en cualquier celda espacial del sistema y corrientes externas entrantes en las fronteras para grupos energéticos y direcciones angulares predeterminadas por el usuario.
- Es posible resolver problemas acoplados de diferentes partículas, lo cual se hace a través del tratamiento multigrupo. Para ello se ha optimizado el uso de la

memoria y debe ser especificado por el usuario la cantidad de grupos de cada partícula a tratar y su correspondiente grilla energética.

Los problemas tratados involucraron típicamente de 60 a 120 grupos energéticos y secciones eficaces desarrolladas hasta orden 7, 15 o 31 con cuadraturas S_8 , S_{16} y S_{32} respectivamente. Se utilizaron hasta dos materiales con mallas de hasta 200 nodos.

4.1.1. Esquema del código AHOT

El programa se puede dividir en 5 bloques. Cada bloque consta de una serie de subrutinas principales que se nombrarán entre paréntesis y se muestran en la Fig. 4.1.

El input se realiza a través de 4 archivos

- constantes del problema, geometría y mapa de materiales
- condiciones de contorno
- cuadratura angular
- secciones eficaces

Las secciones eficaces se leen en formato estándar FIDO desde un archivo ASCII. La lectura de constantes del problema (condat) va seguida de la entrada de datos geométricos y materiales (geodat). Luego se lee la estructura de grupos energéticos (rengy) que permite generar la indexación de memoria para la lectura de secciones eficaces (rxsl). Esta lógica permite, para el caso de problemas sin up-scattering físico, guardar solamente los elementos de la matriz de interacción que son no nulos. El bloque de entrada de datos termina con la lectura de las condiciones de contorno (convertcc) y la cuadratura angular (sn1d).

El bloque de preprocesamiento consiste en el cálculo de los coeficientes de peso (coef) y el ensamblaje e inversión de las matrices de momentos espaciales (matrix).

El algoritmo está formado por un bloque de iteraciones exteriores multigrupo (mltgrp) que llama sucesivamente a una subrutina que computa la fuente exterior a cada grupo (extsrc) y un solver monoenergético (itter). En la Fig. 4.2 se muestra la estructura del esquema de cálculo que definen las iteraciones exteriores. En la Fig. 4.3 se muestra la estructura análoga que se utiliza en las iteraciones internas. En esa figura se añade la estructura que toma si se utiliza la opción de aceleración.

El posprocesamiento contiene la reconstrucción de los flujos, la construcción del estimador de error a posteriori para un grupo (fiagain) y el cómputo del perfil de dosis y carga (cedep).

La salida imprime en un archivo general los flujos escalares medios en cada micromalla, la corriente saliente de cada partícula y los perfiles de dosis y carga (outpr). También se imprimen en formato estándar los flujos escalares medios en cada micromalla y los flujos escalares puntuales, en sendos archivos. Por último, se imprime el perfil de dosis y carga, en archivos separados.

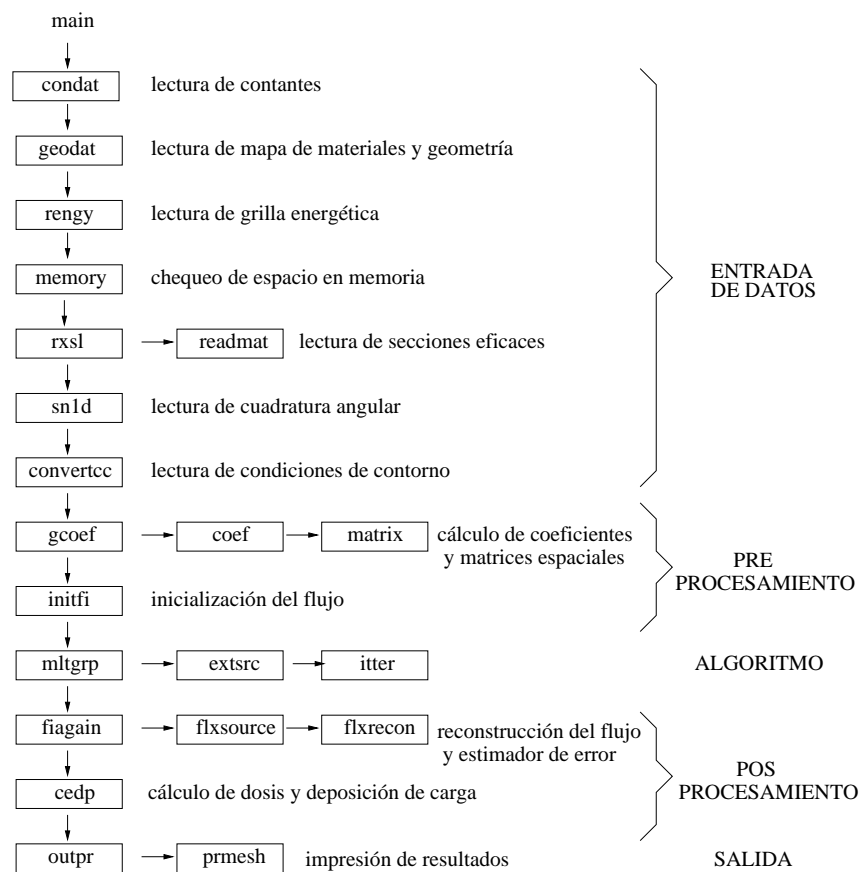


Figura 4.1: Principales rutinas dentro de cada bloque del programa AHOT.

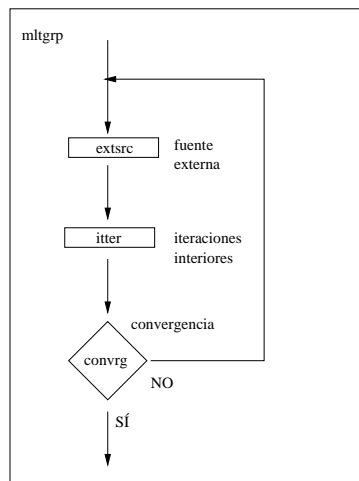


Figura 4.2: Esquema de cálculo de iteraciones exteriores.

Propiedades de las matrices espaciales

La implementación del esquema de tratamiento espacial en la forma WDD requiere matrices espaciales, a_{ij} para cada valor del parámetro $t = \Sigma_t h / 2\mu$ [45]. En particular

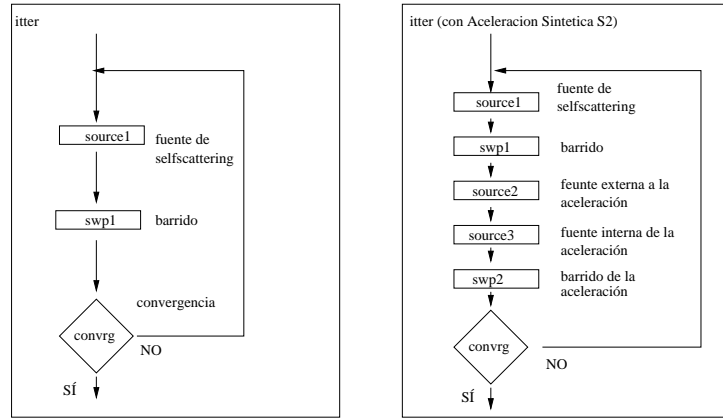


Figura 4.3: Esquema de cálculo del iteraciones interiores con o sin aceleración.

cada término de la matriz inversa verifica

$$a_{ij}^{-1}(-\mu) = (-1)^{i+j} a_{ij}^{-1}(\mu) \quad (4.1)$$

donde i es el índice de fila. Esta propiedad se hace evidente si pensamos que la solución del problema debe ser la misma si invertimos el eje de coordenadas espaciales. Es decir, sólo los momentos impares del desarrollo de la fuente cambian de signo. Teniendo en cuenta esta ecuación y considerando que en este trabajo se utilizaron cuadraturas simétricas, surge que solamente es necesario invertir las matrices espaciales en las direcciones positivas. De esta forma se ahorra la mitad de la memoria requerida para dichas matrices.

Si bien las matrices espaciales se ensamblan y computan para todos sus elementos, se guarda solamente la parte triangular superior, ya que el resto de la matriz puede calcularse según la Ec.(4.2). Esta propiedad es independiente de la cuadratura. Por último, también se halló que las matrices invertidas de orden espacial Λ contienen las matrices de orden inferior en ellas, de modo que para cálculos de distinto orden por malla sólo es necesario el cálculo de los coeficientes alfa de órdenes inferiores correspondientes.

$$a_{ij}^{-1} = (-1)^{i+j} \frac{(2j+1)}{(2i+1)} a_{j,i}^{-1} \quad i > j \quad i, j = 0 \dots \Lambda \quad (4.2)$$

De este modo se guarda casi un cuarto de la memoria que originalmente se utilizaba para almacenar las matrices espaciales.

4.2. Validación de Cálculos Anisotrópicos

Se validó la ampliación del código para incluir núcleos de dispersión anisotrópica en problemas monoenergéticos contra el código ANISN [16, 19]. También se codificó un solver analítico de la ecuación monoenergética en la aproximación de ordenadas discretas cuyas expresiones se desarrollan en el Apéndice A. Esto permitió validar los resultados y computar el error del método de discretización espacial de ambos códigos.

Al cotejar contra el código ANISN, los resultados son comparados respecto de flujos escalares medios que se obtienen en cada micromalla de la discretización espacial, que es la salida estándar de códigos de ordenadas discretas comerciales. En el caso de las soluciones analíticas se promediaron los flujos en las mismas micromallas en estos casos. Por el contrario, cuando se comparan flujos reconstruidos entre ellos o con soluciones analíticas, éstas corresponden a evaluaciones *puntuales* del flujo escalar.

Slab de agua

La primera simulación consiste en un slab de agua de 20 cm de agua de espesor. Sobre su frontera izquierda incide una corriente de fotones de intensidad unitaria de 1.25 MeV. Para este problema monoenergético se utilizó una cuadratura S_8 conjuntamente con un desarrollo angular de secciones eficaces hasta orden $L = 7$ generadas por el código CEPXS. Para el caso de código AHOT se utilizó la aproximación lineal en el desarrollo espacial del flujo. En la Fig. 4.4 se muestran los resultados obtenidos con el código AHOT y se los compara con los de ANISN y con la solución analítica. Los flujos son concordantes entre sí, validando la implementación de scattering anisotrópico.

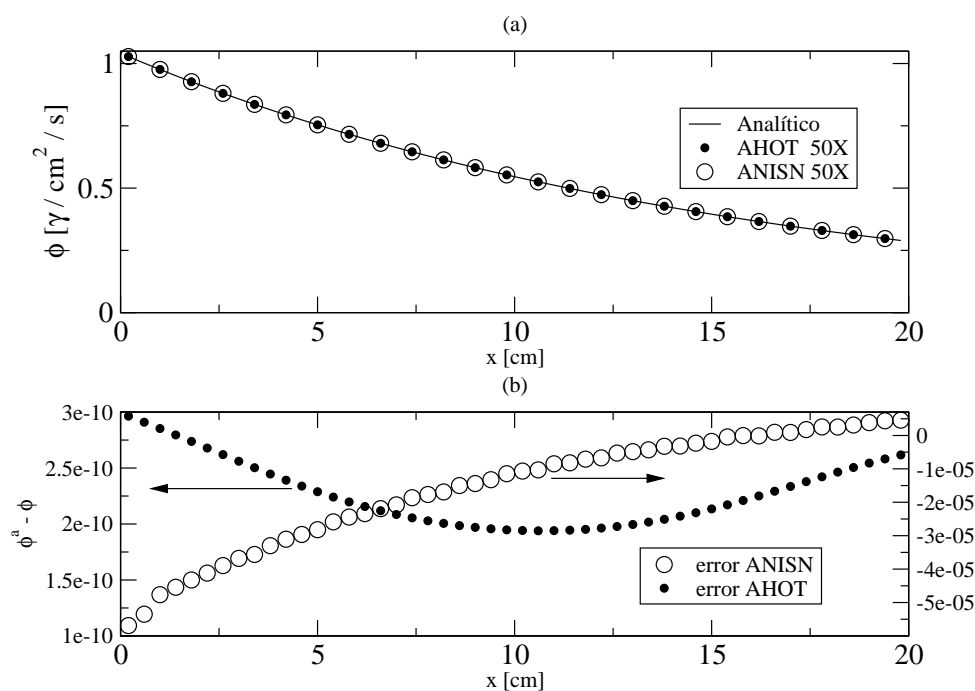


Figura 4.4: Slab de Agua (espesor 20 cm). Corriente unitaria de fotones de 1.25 MeV sobre la cara izquierda. Los resultados de los códigos AHOT son concordantes con la solución analítica, validando la implementación del núcleo de scattering anisotrópico. La Fig.(b) se muestra que el error de AHOT es notoriamente inferior al de ANISN con el mismo criterio de convergencia ($\epsilon_{in} = 1e - 6$).

Slab de aluminio

Para tener en cuenta las exigencias numéricas de partículas fuertemente interactuantes con la materia, se consideró una placa de aluminio de 1.5 cm de espesor sobre la que inciden electrones de 6 MeV cuyo rango en la aproximación de frenamiento continuo es 1.4 cm . Para este problema, se utilizó una cuadratura S_{16} conjuntamente con un desarrollo angular de secciones eficaces hasta orden 15. El hecho de que se trata de electrones de elevada energía con una condición de borde que impone un flujo altamente anisotrópico, requiere no solo un desarrollo elevado de las secciones eficaces sino también la aplicación de la corrección de transporte extendida [32]. En la Fig. 4.5 se muestra el flujo escalar de electrones del cálculo monoenergético. En el recuadro interno se grafica el flujo en el primer milímetro del slab, donde el mismo es esencialmente distinto de cero. En el caso de AHOT se utilizó desarrollo espacial lineal para el flujo. Para obtener la solución analítica y con el código ANISN, se trabajó con un slab adimensionalizado. Este hecho pone de manifiesto que ninguno de estos últimos códigos es apto para cálculo de transporte de electrones. Incluso la diferencia entre la solución analítica y ANISN evidencia la necesidad de utilizar aproximaciones espaciales superiores a diferencias finitas para cálculo de electrones [14, 44].

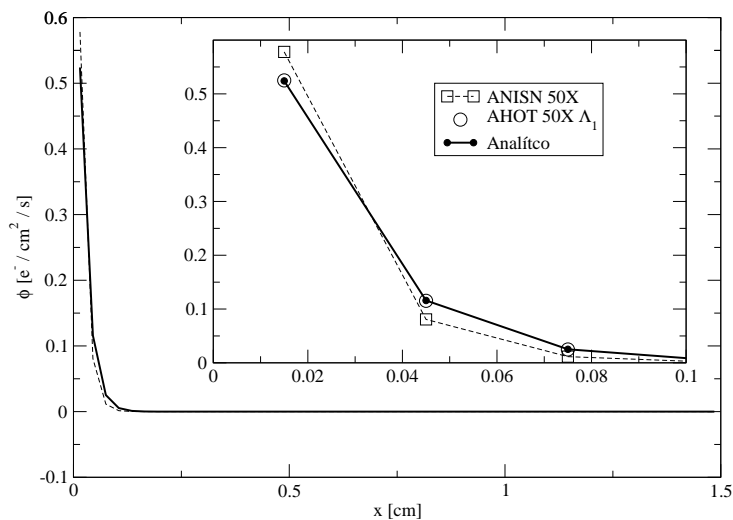


Figura 4.5: Slab de Aluminio (espesor 1.5 cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV en la frontera izquierda. La anisotropía de flujo requiere el uso de una cuadratura elevada S_{16} . El resultado muestra que el método nodal (AHOT) es más preciso que diferencias finitas (ANISN).

En la Fig. 4.6 se muestran los flujos escalares medios del algoritmo base para varias combinaciones de orden de desarrollo y discretización espacial del slab. Al aumentar el orden de desarrollo y reducir la discretización espacial, pareciera haberse perdido información acerca del perfil de flujo cerca de la interface. Sin embargo, estas combinaciones son “equivalentes”, en el sentido que para cualquiera de ellas la reconstrucción de flujo permite conocer su perfil con aproximadamente la misma precisión respecto de la solución analítica, como se muestra en la Fig. 4.7. Debe notarse, sin embargo, que

las reconstrucciones correspondientes a desarrollos de mayor orden tienden a oscilar levemente alrededor de la solución analítica.

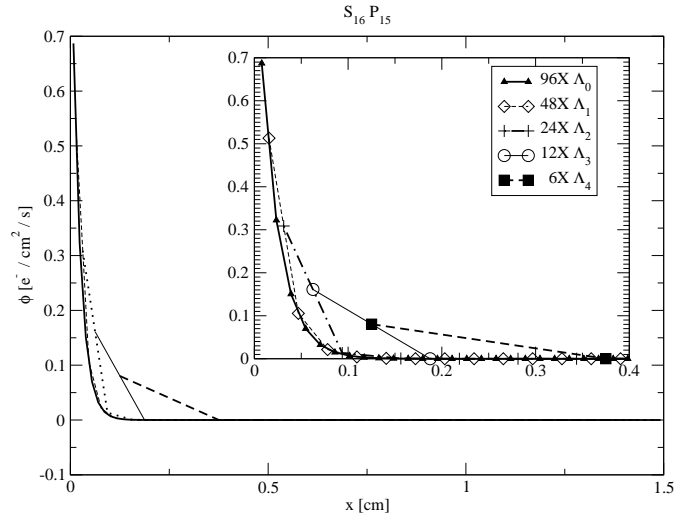


Figura 4.6: Slab de Aluminio (espesor 1.5 cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV. Los cálculos con mayor orden de desarrollo espacial Λ y menor discretización X dan flujos que coinciden con los valores medios de los cálculos con mayor discretización. Es decir, los balances de partículas se alcanzan con la misma precisión.

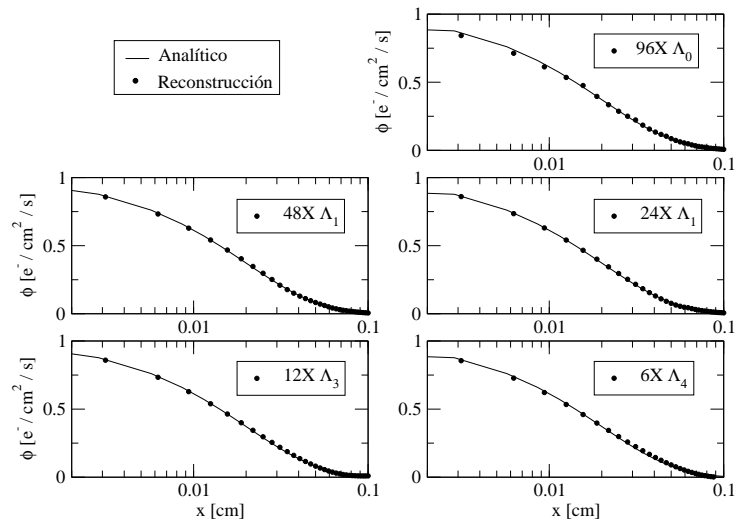


Figura 4.7: Slab de Aluminio (espesor 1.5 cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV. Los cálculos con distinto orden de desarrollo espacial Λ y discretización espacial X son “equivalentes” ya que la reconstrucción del flujo permite conocer el perfil cerca de la interface con la misma precisión respecto de la solución analítica. Nótese que la escala espacial logarítmica muestra el sólo el primer milímetro del slab.

Interace músculo hueso

Repasamos en este punto los principales resultados de convergencia del método nodal AHOT [45]. Sea $\underline{\psi}$ el vector de flujos angulares de la aproximación de ordenadas discretas del método nodal. Sea $\underline{\psi}^a$ el vector análogo correspondiente a la solución analítica espacial en la misma aproximación. Sea \mathbf{M}_λ el operador definido por

$$\mathbf{M}_\lambda f(x) = \int f(x) p_\lambda dx \quad (4.3)$$

Tenemos que para $h \rightarrow 0$

- a) $\|\underline{\psi} - \underline{\psi}^a\| = O(h^{\Lambda+2})$
- b) $\|\mathbf{M}_\lambda(\underline{\psi} - \underline{\psi}^a)\| = O(h^{\Lambda+2})$
- c) $\max \{ |\psi_m(x_{k+1/2}) - \psi_m^a(x_{k+1/2})|, k = 1, \dots, K, m = 1, \dots, N \} = O(h^{2\Lambda+1})$

Para analizar la convergencia del código con la introducción del núcleo de dispersión anisotrópica, se trató un problema de fuente de radiación gamma por decaimiento β^+ y posterior aniquilación del positrón. La geometría se definió como un sándwich de tres slabs de 3 cm de espesor cada uno, dos laterales de tejido muscular y uno central de hueso (composición según ICRP [2]). En el tejido muscular se introduce una fuente isotrópica y homogénea de 511 keV a través, por ejemplo de un radiofármaco marcado con F-18. En el hueso la fuente se consideró nula y se impuso condición de vacío en los extremos del slab. En la Fig. 4.8.(a) se grafica el flujo de fotones resultante de cálculos teniendo en cuenta el plano de simetría con condición de reflexión. En la Fig. 4.8.(b) se grafica el error de los flujos medios por malla respecto de la solución analítica de ambos códigos. Se observa que, aunque el comportamiento espacial del error es similar, el error del método nodal con desarrollo lineal del flujo es notoriamente inferior al código de diferencias finitas. Se recuerda que por solución analítica denominamos la solución espacial exacta de la ecuación de ordenadas discretas.

Para analizar la convergencia de este último problema se tomó como medida del error la máxima diferencia de flujo escalar medio respecto de la solución analítica. Los órdenes de convergencia así obtenidos se muestran en el Cuadro. (4.1). Estos valores son comparables a los órdenes teóricos de convergencia para la diferencia del flujo escalar en norma L^2 dados por $2\Lambda + 2$. Respecto de las discrepancias, téngase en cuenta que a partir de estos cálculos no es posible determinar si se alcanzó la tasa de convergencia límite, y aunque la solución analítica supone ninguna aproximación espacial, la resolución del sistema de ecuaciones numérico introduce errores.

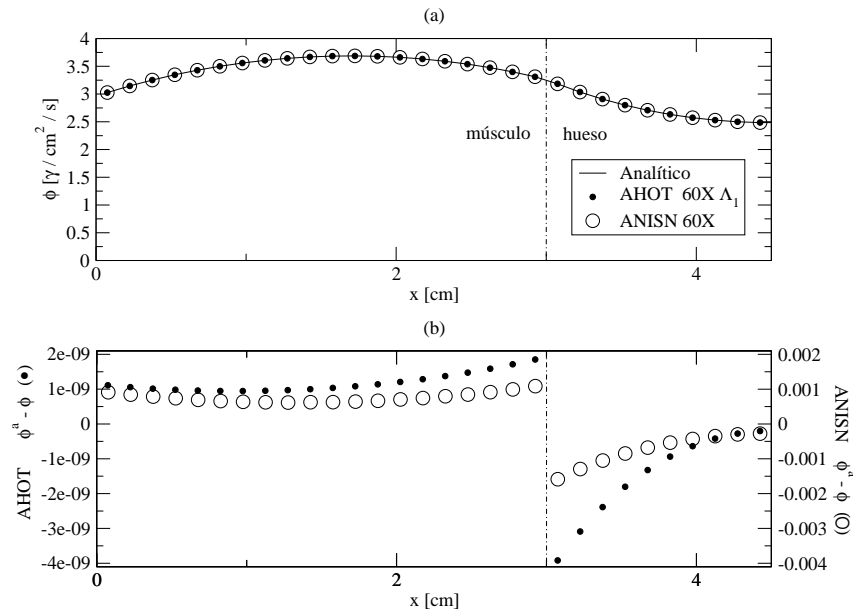


Figura 4.8: Slab de tejido muscular y hueso (composiciones ICRP) con una fuente isotrópica de fotones de 511 keV uniformemente distribuida en el músculo de 3 cm de espesor que rodea al hueso (slab de 3 cm). En (a) se grafica la solución para el flujo de fotones para el código AHOT, ANISN y Analítico con condición de reflexión en la cara derecha. En (b) se muestra la diferencia entre el flujo medio por malla de los códigos con aproximación espacial y la solución analítica.

Orden	Orden	Orden Teórico
$\Lambda = 0$	1.92	2
$\Lambda = 1$	3.90	4
$\Lambda = 2$	5.4	6
$\Lambda = 3$	7.24	8
$\Lambda = 4$	10.1	10

Tabla 4.1: Orden de convergencia del método nodal con núcleo de scattering anisotrópico (P_5). Se compara el orden teórico contra el cálculo tomando como norma la máxima diferencia del flujo escalar medio por micromalla.

4.3. Validación de Cálculos Multigrupo

Para validar la aproximación multigrupo se resolvieron algunos casos de transporte de neutrones en aproximación de tres grupos con secciones eficaces condensadas a partir de la biblioteca Vitamin-B6. La condensación de 199 grupos a 3 grupos se realizó con un espectro obtenido en un estudio de dosimetría ex-vessel de Atucha I [1]. Se simuló un slab de agua pesada de 50 cm de espesor sobre el que incide en su cara izquierda un flujo unitario para el grupo rápido en la dirección entrante para una cuadratura S_2 . El resto de las condiciones de contorno son de vacío. En al Fig. 4.9 se compara el código AHOT con el código ANISN para una discretización espacial “con-

vergida" (50 mallas). En este caso la coincidencia de los valores de flujo entre ambos códigos valida la implementación multigrupo en el código AHOT.

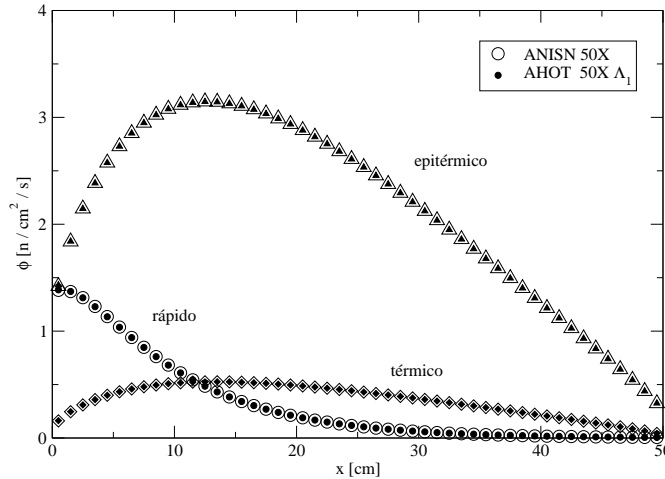


Figura 4.9: Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). Scattering anisotrópico hasta orden 3 y cuadratura S_2 . La condición de contorno en el código ANISN se simula con una fuente direccional en una celda micrométrica sobre la interface izquierda del slab. La correspondencia entre los flujos valida la implementación de la aproximación multigrupo en el código AHOT.

Por otra parte, en la Fig. 4.10 mostramos el mismo cálculo pero con sólo 10 mallas. En este caso, observamos una discrepancia leve cerca de la interface izquierda entre ambos códigos. El código AHOT, además de acercarse más a la solución de referencia permite con la reconstrucción obtener un perfil de flujo escalar puntual con un nivel de detalle similar al de la solución de referencia, como se grafica en la Fig. 4.11.

4.3.1. Acople de campos con diferente orden de desarrollo espacial

Para estudiar las bondades del método de desarrollo espacial de orden arbitrario se planteó un problema de acople de dos partículas. El problema consiste en un slab de cobre de 3 mm de espesor. Sobre él inciden un haz plano de electrones de 6 MeV con un rango de aproximadamente 4.4 mm. El haz tiene una divergencia de 13.4° , pues se fijó la condición de contorno en la dirección discreta más próxima a la normal de una cuadratura S_{16} . Se utilizaron 50 grupos de electrones (espaciamiento lineal) y 20 grupos de fotones (espaciamiento logarítmico $E_{g+1} = kE_g$). Se utiliza espaciamiento logarítmico para conocer con detalle el perfil del espectro saliente de bremsstrahlung. Se empleó en este cálculo el operador de frenamiento continuo de primer orden (CSD1). Por otro lado, la experiencia en cálculo determinístico ha mostrado que la convergencia de cantidades integrales (dosis, deposición de carga, espectros) se alcanza con menos grupos de fotones que de electrones. En la Fig. 4.12 se grafica la solución del flujo de

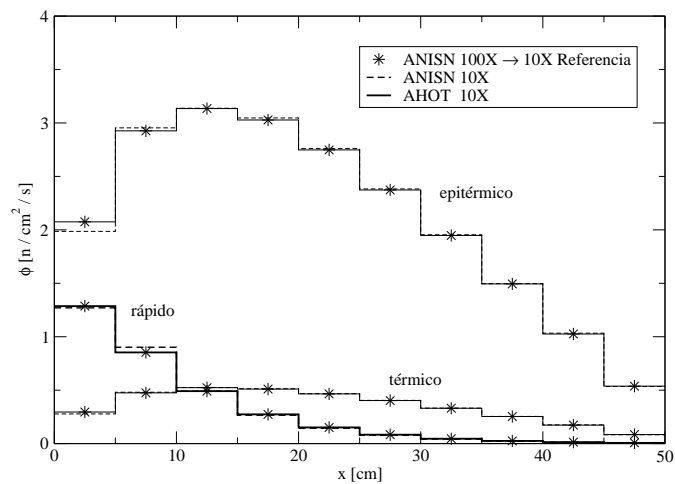


Figura 4.10: Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). Se grafican los flujos escalares medios en cada malla. La mayor precisión de la aproximación espacial del código AHOT se ve reflejada en que aproxima mejor la solución de referencia. La solución de referencia ANSIN100X \rightarrow 10X se generó homogeneizando en 10 mallas los flujos medios correspondientes a una corrida con 100 mallas.

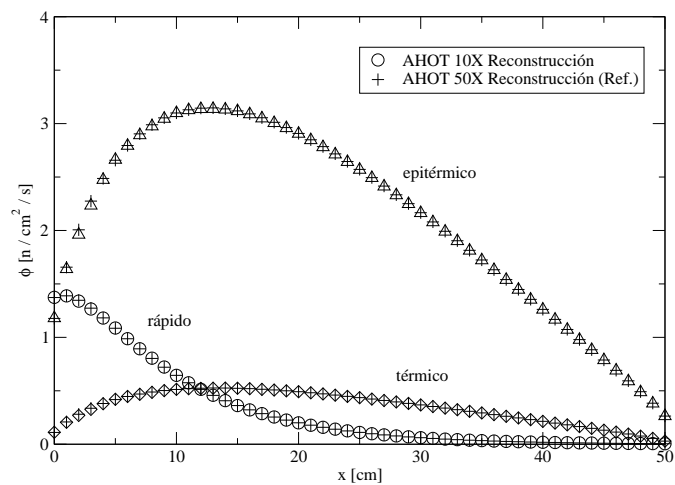


Figura 4.11: Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). El código AHOT no sólo permite obtener flujos medios más precisos con menor cantidad de mallas que un código de diferencias finitas, sino que el algoritmo reconstructor permite reproducir el perfil de flujos escalares puntuales emulando, en este sentido, la información de una corrida de una mayor densidad de mallas.

los electrones de máxima energía ($E \in [5.94 \text{ MeV}, 6.0 \text{ MeV}]$). Como en el caso de corriente de electrones incidiendo en un slab de aluminio, se disminuyó la discretización espacial aumentando el orden de desarrollo espacial para esta partícula. Los flujos reconstruidos permiten reproducir los altos gradientes del flujo, con la salvedad que los polinomios de mayor orden tienden a oscilar levemente. Para los fotones se mantuvo el orden de desarrollo espacial lineal, dado que la fuente de éstos está más homogénea-

mente distribuida espacialmente y sus caminos libres medios son largos, produciendo soluciones relativamente más suaves que se muestran en la Fig.4.13.

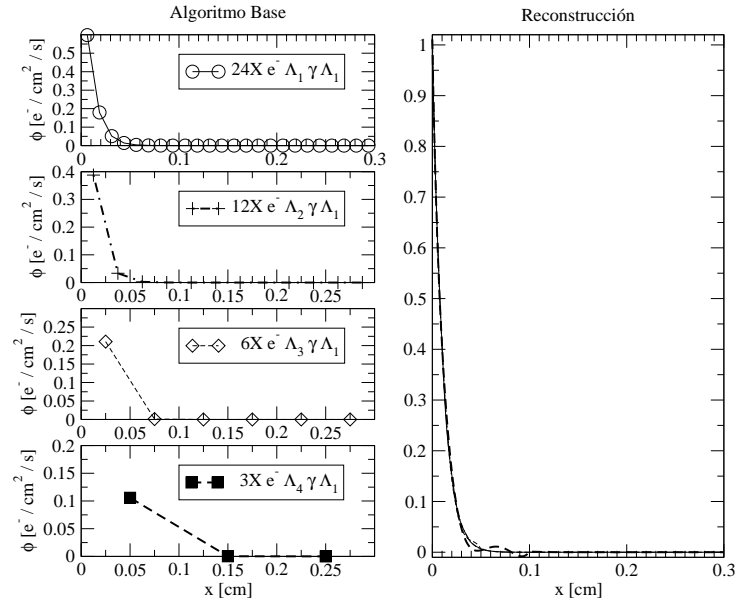


Figura 4.12: Slab de cobre (epesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV incide normalmente en la cara izquierda. Se resuelve el problema acoplado en el cálculo los fotones utilizando el método $P_{15} S_{16}$. En (a) se muestran flujos medios por malla para electrones con $E \in [5.94 \text{ MeV}, 6.00 \text{ MeV}]$ correspondientes a diferentes discretizaciones espaciales y orden de desarrollo espacial para electrones. En (b) se muestran flujos puntuales reconstruidos que evidencian que el aumento de orden permite seguir describiendo el gradiente de flujo, salvo por una leve oscilación para los polinomios de mayor orden.

4.4. Conclusiones

En este capítulo se mostró la implementación del núcleo de dispersión con desarrollo angular de orden arbitrario y la aproximación multigrupo. Se esquematizó la estructura del código y se mostraron algunas propiedades que permiten hacer más eficiente el almacenamiento en memoria de las secciones eficaces y las matrices espaciales.

Luego se trataron algunos de los casos de validación de cada una de las ampliaciones del código original, encontrándose resultados satisfactorios. En particular, el aumento de orden espacial de las partículas cargadas en problemas con fuente de electrones puede utilizarse para acelerar el cálculo. Ésto se verifica en la Fig. 4.14 donde los cálculos son equivalentes en el computo de cantidades integrales tales como la dosis o el espectro saliente de fotones como se verá en el siguiente capítulo. En el cálculo de los tiempos se computa el preprocesamiento de coeficientes y la resolución del algoritmo base, pero se deja de lado el posprocesamiento.

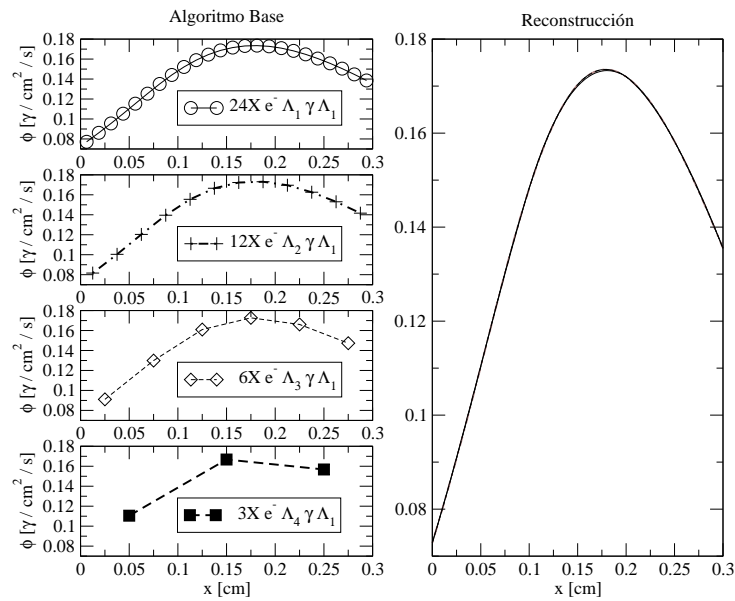


Figura 4.13: Slab de cobre (espesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV inciden normalmente en la cara izquierda. Las diferentes curvas corresponden a diferentes discretizaciones espaciales y orden de desarrollo espacial para electrones. Se mantiene el orden lineal de desarrollo espacial del flujo de fotones sin pérdida de precisión en las cantidades integrales. (a) Se muestra el flujo medio por malla para fotones con $E \in [179 \text{ keV}, 246 \text{ keV}]$. (b) Se muestra la superposición de flujos puntuales reconstruido para la misma energía.

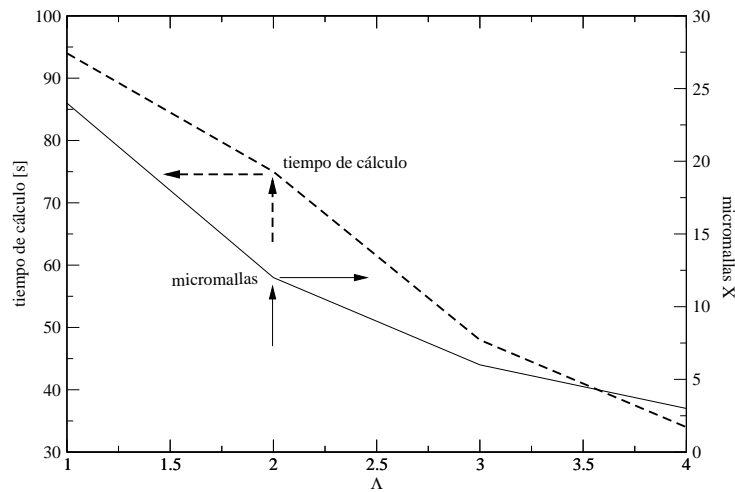


Figura 4.14: Slab de cobre (espesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV inciden normalmente en la cara izquierda. Se resuelve el problema acoplando en el cálculo los fotones. La disminución de la discretizaciones espaciales y el aumento de orden de desarrollo espacial sólo para electrones permiten disminuir el tiempo de cálculo sin pérdida de precisión en las cantidades integrales (dosis, espectros salientes). El cómputo de tiempo tiene en cuenta el preprocesamiento y resolución del algoritmo base.

Capítulo 5

Cálculos de Transporte Acoplado

Estando las implementaciones multigrupo y de núcleo de scattering arbitrariamente anisotrópico validadas, se trataron algunos casos particulares de transporte acoplado electrón-fotón. Se seleccionaron casos relacionados con aplicaciones de tratamiento radiante, que contemplan desde el diseño de los blancos de aceleradores hasta la determinación de dosis en pacientes. Los resultados se comparan con el código ONELD [36] en primera instancia. Luego se contrastan las soluciones del modelo determinístico contra modelos estocásticos a través de código MCNP (versiones 4B y 5) [31].

5.1. Blanco de Cobre

Como caso de estudio de diseño de blancos (“target”) de aceleradores (LINAC) para generación de espectro de fotones, se resolvió el transporte de electrones de 6 MeV en un slab de cobre de 3 mm de espesor. El haz plano incide en la cara izquierda con una divergencia de $\pm 13.4^\circ$ utilizando una cuadratura S_{16} . Inicialmente se evalúa el espectro saliente de fotones, que es la magnitud fundamental en el diseño del target. Luego se utilizó este mismo caso para estudiar el perfil de dosis y de deposición de carga, magnitudes de interés para otras aplicaciones.

5.1.1. Corriente parcial de fotones salientes del blanco

La corriente parcial de fotones está dada por

$$J^+(E) = \frac{2\pi}{E} \int_0^1 \psi^f(T, E, \mu) \mu d\mu \quad (5.1)$$

donde $\psi^f(T, \mu, E)$ es el flujo angular de fotones en la coordenada T de la cara derecha del slab en función del coseno μ con respecto a la normal y la energía E .

En la Fig. 5.1 se muestran los resultados de corriente saliente de fotones para 40 grupos (lineales) de electrones y 20 grupos (logarítmicos) de fotones, seleccionando la energía de corte en 10 keV . Los grupos de fotones son logarítmicos para poder mostrar adecuadamente la caída del espectro de bremsstrahlung con la energía, como se

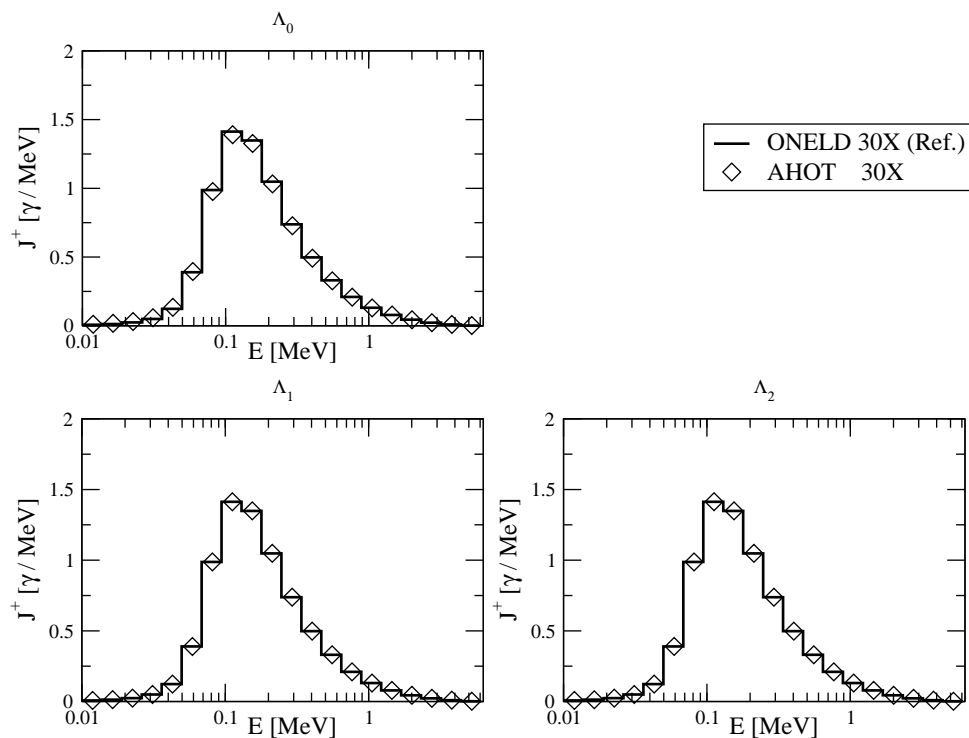


Figura 5.1: Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT reproduce los resultados de ONELD, para la misma discretización espacial con órdenes de desarrollo espacial superiores a cero. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento continuo de segundo orden (CSD2).

comentó anteriormente. k es igual a 0.79 en este caso. Las secciones eficaces fueron generadas utilizando el operador de moderación de segundo orden (CSD2). Esta figura muestra que con la misma discretización espacial, los resultados de AHOT son equivalentes a ONELD con orden igual o superior a lineal. Esto es consistente con el hecho de que el código ONELD tiene un tratamiento espacial lineal-discontinuo (“linear-discontinuous”) cuyo orden de convergencia es similar a AHOT con orden de desarrollo lineal (Λ_1).

En la Fig. 5.2 se muestra el cálculo de ONELD con 30 mallas como referencia utilizando el operador de primer orden. Este cálculo se compara primero con la solución de ONELD con solo 2 mallas espaciales. Observamos que la baja discretización espacial produce que la corriente de fotones de baja energía sea sobreestimada. Por otro lado, el código AHOT permite para esta baja discretización espacial aumentar el orden de desarrollo espacial. En el ejemplo se utiliza orden Λ_4 para electrones, específicamente para poder resolver espacialmente con precisión la dosis simultáneamente. Con orden Λ_0 para fotones, la corriente de baja energía todavía es alta. Para Λ_1 la convergencia es buena sin necesidad de aumentar la discretización espacial, ganando hasta un 50% de eficiencia en el tiempo de cálculo respecto de AHOT con Λ_1 y 30 mallas.

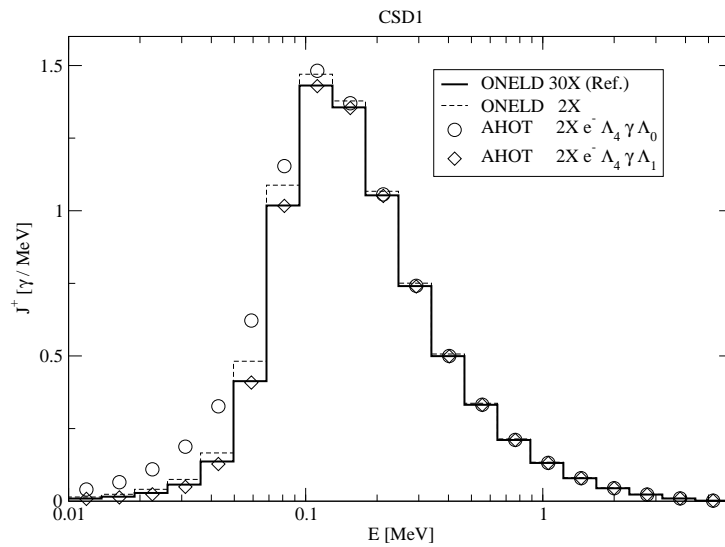


Figura 5.2: Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT reproduce los resultados de ONELD, incluso para discretizaciones espaciales inferiores, aumentando convenientemente el orden de desarrollo espacial de las partículas. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento continuo de primer orden (CSD1).

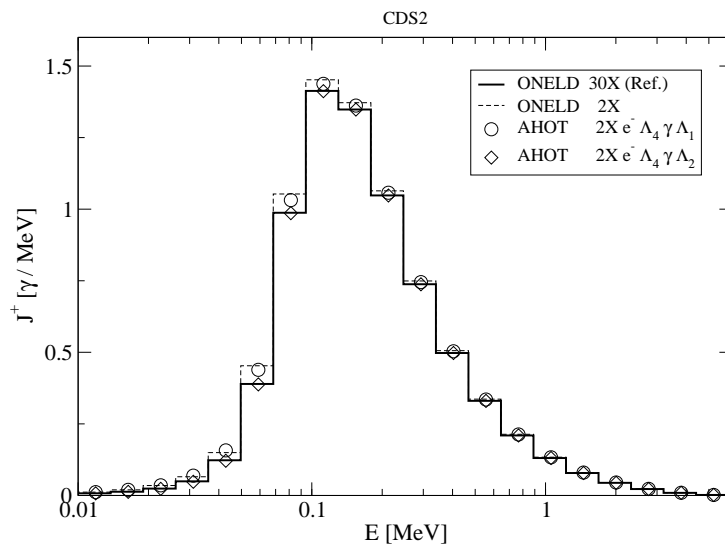


Figura 5.3: Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT permite seleccionar órdenes de desarrollo espacial independientes para cada partícula, de modo de obtener la convergencia con un número bajo de mallas. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento de segundo orden (CSD2).

En la Fig. 5.3 se muestran cálculos similares pero utilizando el operador de frenamiento de segundo orden. En este caso la concordancia se alcanza para orden de desarrollo cuadrático del flujo de fotones. Esto indica que este operador energético

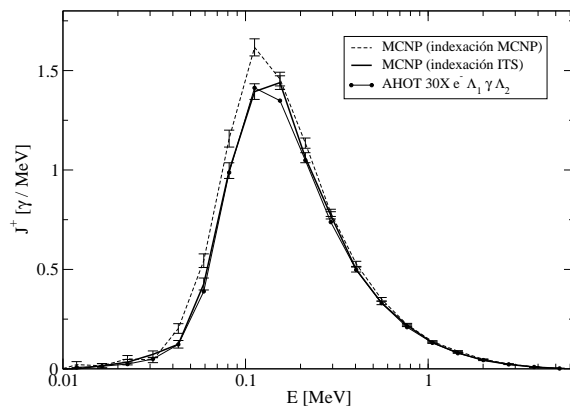


Figura 5.4: Slabs de Cobre. Corriente saliente de fotones. Se compara el resultado del modelo determinístico con cálculos estocásticos con diferente indexación energética. La indexación ITS resulta más concordante con el modelo determinístico y la discrepancia de la indexación MCNP se explica en función del efecto que ésta produce sobre la interpolación de parámetros de transporte.

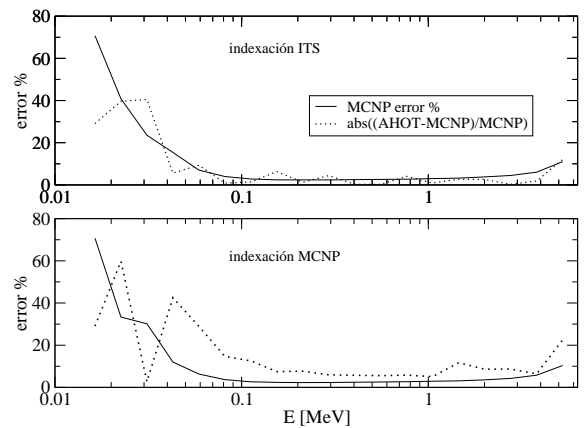


Figura 5.5: La diferencia entre la corriente predicha por el modelo determinístico y estocástico cae prácticamente dentro de la banda de error, en el caso de indexación ITS con 25000 historias. El método determinístico y la indexación MCNP difiere más que el error estadístico. Obsérvese el altísimo error porcentual de MCNP a bajas energías, debido a que se trata de eventos poco probables.

de mayor orden requiere comparativamente una mayor convergencia o discretización espacial. Recalamos que, para cualquiera de los operadores de moderación, AHOT permite calcular la corriente con menos mallas eligiendo convenientemente el orden de desarrollo espacial.

En la Fig. 5.4 se compara el espectro saliente de fotones correspondiente a los códigos AHOT, utilizando el operador CSD2, contra soluciones del código MCNP con distintas indexaciones energéticas. Como se discutió en el capítulo anterior, la indexación energética MCNP interpola las secciones eficaces con un corrimiento energético de medio grupo hacia arriba o medio grupo más energético. Dado que el frenamiento de electrones es una función decreciente de la energía, electrones con secciones eficaces más energéticas al principio se frenan menos y penetran más en el target. Los fotones son generados más cerca de la interface derecha y escapan del target, resultando en una corriente sobreestimada. Por el contrario, la indexación ITS produce resultados que se aproximan mejor la solución obtenida con el tratamiento determinístico. En este caso, las discrepancias caen prácticamente dentro del error estadístico del cálculo corrido con 25000 partículas, como se muestra en la Fig. 5.5

En la Fig. 5.6 se grafican los espectros salientes de fotones para distintos espesores del blanco de cobre. Se observa el endurecimiento del haz por absorción de fotones en el blanco y la correspondiente disminución de la eficiencia de conversión a medida que aumenta el espesor del blanco. Para el caso de 3 y 6 mm, la concordancia de MCNP (indexación ITS) y AHOT cae dentro del error estadístico cuando se consideran 25000 historias. Para 10 mm la discrepancia aumenta, aún cuando el caso determinístico esta

convergió espacialmente. Discordancias de este tipo también fueron reportada por Williams [44] al tratar blancos “gruesos”. En la Fig. 5.7 se presentan las corrientes salientes en el caso de un slab de 3 mm de espesor pero distintas energías incidentes. Se observa que al aumentar la energía de 6 a 10 o 18 MeV, aumenta la corriente de fotones, pero dado que el rango de electrones (Ver Tabla. 5.1) sobrepasa el espesor del target, la eficiencia global de conversión va decayendo. En este caso, la concordancia entre los cálculos estocásticos, con indexación ITS, y determinísticos es buena.

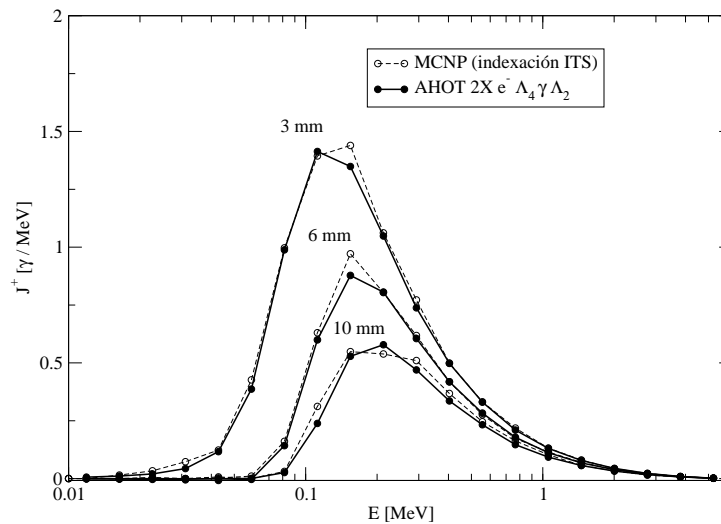


Figura 5.6: Slabs de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes para diferentes espesores de slabs. El aumento de espesor redonda en una pérdida de eficiencia de conversión en radiación de frenamiento con un endurecimiento del espectro por absorción de fotones en el blanco. Utilizado en el cálculo determinístico el operador de segundo orden (CSD2), la concordancia con el código estocástico utilizando indexación ITS es buena.

Energía [MeV]	Rango CSDA [cm]
6	0.44
10	0.68
18	1.07

Tabla 5.1: Rango CSDA de electrones energéticos en cobre (densidad 8.96g/cm³).

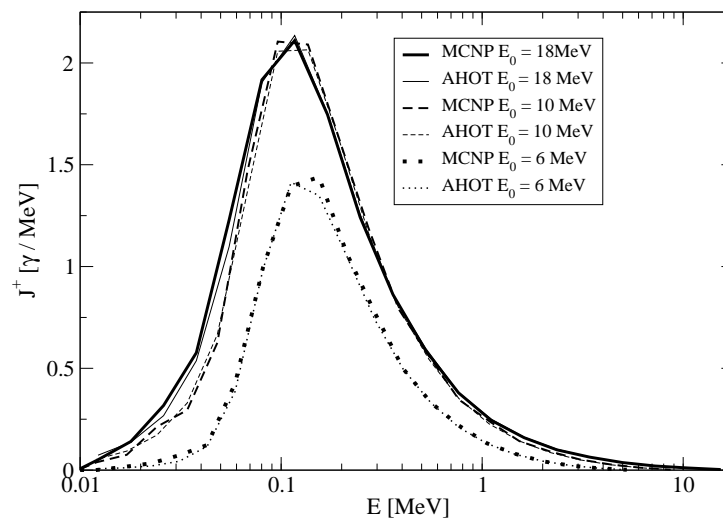


Figura 5.7: Slab de Cobre (espesor 3 mm). Corriente parcial de fotones salientes para diferentes energías incidentes de electrones. Al aumentar la energía de los electrones, aumenta la energía convertida. Pero la eficiencia de conversión se deteriora, dado que el rango de los electrones aumenta y éstos escapan del target. Los cálculos determinísticos fueron evaluados con dos mallas ($2X$) y con orden espacial de desarrollo Λ_4 para electrones y Λ_2 para fotones.

Tiempos de cálculo de corriente parcial de fotones

Por último, se hace un comentario breve sobre los tiempos de cálculo involucrados en los ejemplos anteriores, teniendo en cuenta las siguientes salvedades:

- en el cálculo determinístico se utiliza la aproximación unidimensional, en tanto que en los cálculos estocástico se resolvieron problemas tridimensionales con simetrías.
- no se ha utilizado ninguna técnica de reducción de varianza en de MCNP.
- se comparan tiempos de cálculo secuenciales (por oposición a paralelos) debido a que al código determinístico no se le ha implementado ninguna versión paralelizada.
- el cálculo determinístico provee de mayor información que simplemente el espectro saliente de fotones (incluir tallies en el código MCNP que reproduzcan estas cantidades en una única corrida sería costosísimo).

En definitiva, los tiempos que se muestran en la Tabla 5.2 no quieren representar los tiempos óptimos de cálculo ni en uno ni en otro tipo de método. De todos modos, se pretende mostrar que la eficiencia de la aproximación determinística es mayor.

Código [MeV]	Corrida	Tiempo [min]	CPU [MHz]
AHOT	$2Xe^- \Lambda_4 \gamma \Lambda_2$	0.27	850
AHOT	$30Xe^- \Lambda_1 \gamma \Lambda_1$	1.25	850
ONELD		0.12	850
MCNP	nps 25000	36.29	1250

Tabla 5.2: *Tiempos de cálculo de espectro saliente de fotones. Los casos corresponden a cálculos secuenciales. nps se refiere al la cantidad de historias corridas.*

Conclusión sobre los espectros de bremsstrahlung

A partir de los resultados obtenidos, se concluye que estos cálculos determinísticos permiten, dentro de la aproximación que supone la geometría unidimensional, obtener eficientemente espectros de bremsstrahlung de haces monoenergéticos de electrones, de suma utilidad para el diseño de target de aceleradores con fines de aplicación en tratamientos radiantes. En las corridas se han variado parámetros para el diseño del target, entre cuyos requerimiento se pide obtener la máxima eficiencia de producción de bremsstrahlung.

5.1.2. Deposición de energía

En esta sección presentamos soluciones a la deposición de energía a lo largo del slab de cobre. En este caso, debido a que el haz incidente es de electrones y el espesor del slab (3mm) es delgado para los fotones generados ($\mu = 0.28 \text{cm}^{-1}$) la deposición de energía se debe casi exclusivamente a electrones ($\sim 97\%$). De todos modos, se ha realizado el cálculo acoplado para poder computar el espectro saliente de fotones simultáneamente.

Una de las ventajas intrínsecas de los cálculos determinísticos es que permiten obtener superficies de isodosis con relativa facilidad, caracterizadas por perfiles suaves sin el ruido estadístico que tienen las soluciones Monte Carlo. La energía impartida se determina a través de la siguiente expresión [14]

$$D = \int_{E_{min}}^{E_{max}} \left(\Psi^f(E) \frac{\Sigma_{en}^f}{\rho} + \Psi^e(E) \frac{\Sigma_{en}^e}{\rho} \right) dE \quad (5.2)$$

donde $\Psi^f(E)$ y $\Psi^e(E)$ son las fluencias energéticas de ambas partículas ($J \text{cm}^{-2} \text{MeV}$) y $\Sigma_{en,i}$ la sección eficaz de absorción de energía (cm^{-1}) que se define para la partícula i por

$$\Sigma_{en} = \Sigma_t - \sum_j \int_{E_{min}}^E \frac{E'}{E} \Sigma^{i \rightarrow j}(E \rightarrow E') \quad (5.3)$$

donde el subíndice j recorre todas las partículas del cálculo. Estas definiciones dependen de E_{min} , la *energía de corte*. Esta energía asegura que todas las interacciones sufridas por partículas de energías inferiores resulten en procesos *locales* relativos a la escala espacial del problema. Esto no implica una restricción mayor para la determinación de

dosis en aplicaciones donde las escalas locales del problema están muy por encima de la impuesta por la energía de corte. En este caso, la energía de corte fijó en 10 keV (rango CSDA $0.5 \mu\text{m}$).

En la Fig. 5.8 se muestra la solución determinística comparada con un perfil de dosis generado con MCNP utilizando indexación MCNP. La solución estocástica muestra un corrimiento del perfil hacia la derecha (o deposición de dosis más profunda). Este discrepancia es concordante con el efecto que produce la interpolación MCNP de las secciones eficaces.

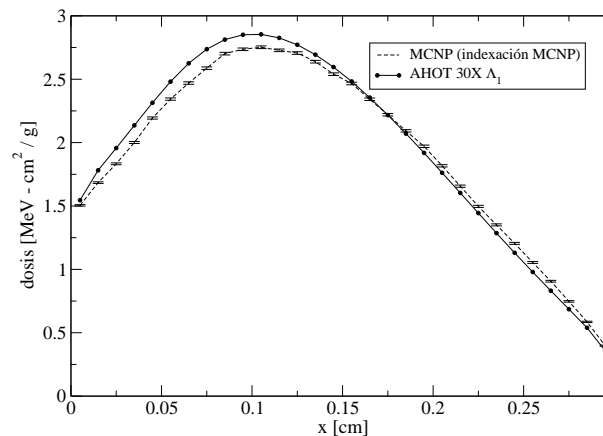


Figura 5.8: Slab de Cobre (espesor 3 mm). Deposición de energía de electrones de 6 MeV . Se comparan el resultado determinístico con cuadratura S_{16} con un cálculo estocástico corrido con MCNP usando indexación energética MCNP. En este último se corrieron 100000 historias para mostrar que la discrepancia no se debe a errores estocásticos sino al tipo de interpolación de las secciones eficaces.

Por otro lado, en la Fig.5.9 se muestra un cálculo Monte Carlo con indexación ITS. Aún cuando la concordancia es evidentemente superior, presenta todavía diferencias con el cálculo determinístico.

Las discrepancias, que no se deben a error estadísticos, pueden tener origen en distintos factores. Por el lado del código determinístico

1. la condición de borde en MCNP corresponde a un haz plano, mientras que en los códigos de ordenadas discretas, el haz incidente, al fijar el flujo entrante en la dirección más perpendicular al slab, tiene una divergencia de 13.4° con cuadratura S_{16} . Esto lo corroboramos corriendo un caso con cuadratura S_{32} consiguiendo mayor concordancia en los resultados en las primeras celdas del slab.
2. la no convergencia energética del operador de moderación.
3. la no convergencia espacial.

Salvo el primer factor, los otros no explican las discrepancias, pues corriendo cálculos con el doble de discretización energética o con la mitad de mallas, obtenemos el mismo resultado con lo cual creemos que se ha alcanzado la convergencia. Por el lado del código estocástico, los factores pueden ser:

1. la invalidez de la teoría de múltiple scattering en las proximidades de las interfaces.
2. el código MCNP no permite hacer "segmentación" de tallies *F8, es decir, realizar balances de energía impartida en subdominios de una celda homogénea.

Debido a este último factor y para reproducir un perfil de dosis es necesario, por tanto, dividir un slab homogéneo en más de una celda. La separación en celdas introduce interfaces artificiales y trae aparejado el problema de los algoritmos clásicos de historias condensadas que son incapaces de representar satisfactoriamente el flujo de electrones cerca de la interfaces materiales.

Estos factores podrían explicar las diferencia haciendo el siguiente análisis. Dado que el haz plano es más anisotrópico que el haz divergente, penetra más, disminuyendo la dosis cerca de la interface izquierda. En el recuadro de la Fig. 5.9 se muestra que la solución de MCNP se aproxima al cálculo AHOT con cuadratura S_{32} , el cual permite representar mejor la condición de contorno de haz con incidencia normal. Por otro lado, las interfaces de celda producen en MCNP que la distribución de electrones sea más anisotrópica que lo que predice la teoría de scattering múltiple [39]. Este último fenómeno explica que la dosis de MCNP caiga respecto de la de AHOT cerca de la interface derecha.

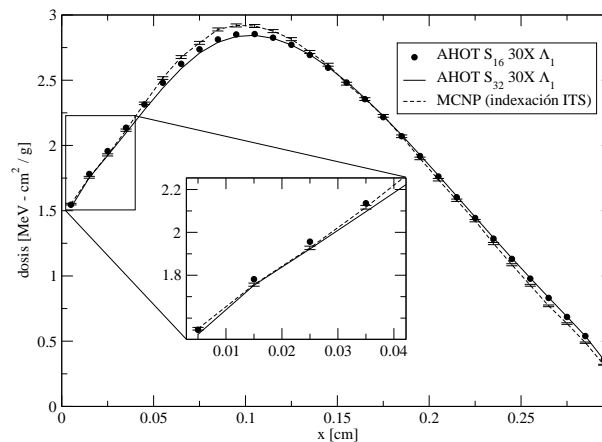


Figura 5.9: Slab de Cobre (espesor 3 mm). Deposición de energía de electrones de 6 MeV. Se comparan los resultados determinísticos con un cálculo estocástico corrido con MCNP con indexación energética ITS. La concordancia de resultados es mejor. El recuadro muestra que un aumento de discretización angular a S_{32} permite reproducir la condición de contorno de haz plano con incidencia normal.

Perfil de dosis a partir de flujo reconstruido

Al validar las implementaciones anisotrópicas y multigrupo, se observó que el código AHOT permite acelerar los cálculos utilizando desarrollos espaciales de alto orden con menor discretización espacial. Vimos que la reconstrucción del flujo provee información detallada del perfil flujo. En esta sección mostramos que el método AHOT no sólo da los valores medios de dosis, sino que permite obtener el perfil continuo de energía impartida a partir de los flujos escalares reconstruidos. En estas simulaciones, trabajamos con 50 grupos de electrones y 20 de fotones, con secciones eficaces para el operador de moderación de primer orden.

En la Fig. 5.10 se muestran resultados de reconstrucción de dosis para distintas expansiones espaciales. Por otro lado, con expansión lineal y 10 mallas, podemos calcular la deposición de dosis en puntos intermedios emulando un cálculo a 30 mallas sin pérdida de precisión. La misma ventaja se muestra expandiendo el flujo en polinomios cuadráticos y cúbicos necesitando sólo 5 y 3 mallas para el algoritmo base, respectivamente. Nótese, por otro lado, que la reconstrucción permite conocer el valor de la dosis en la superficie del slab.

En la Fig. 5.11 se muestra la utilidad de la reconstrucción del flujo utilizando un orden elevado de desarrollo espacial. En este caso, se han desarrollado espacialmente los grupos de electrones hasta orden 4, ya que éstos presentan gradientes abruptos y determinan la deposición de dosis, y orden 0 para fotones. Se observa que un cálculo a 2 mallas con ONELD no reproduce satisfactoriamente los niveles de dosis. Por su parte, AHOT no sólo da correctamente los valores medios para las dos celdas de cálculo, sino que a partir de la reconstrucción permite visualizar el perfil detallado de deposición de energía como se muestra en los ejemplos con 19 y 39 puntos de integración que remarcan que la reconstrucción es continua y el usuario puede definir los puntos de evaluación. Nótese que la reconstrucción insume tiempos de cálculo, pero en estos casos son esencialmente despreciables frente al algoritmo base.

Tiempos de cálculo de dosis

La comparación de tiempos de cálculo de perfiles de deposición de energía son especialmente favorable para el tratamiento determinístico. En la Tabla 5.3 se muestran algunos casos.

Código	Corrida	Tiempo [<i>min</i>]	CPU [MHz]
AHOT	$2X e^- \Lambda_4 \gamma \Lambda_1$	0.36	850
AHOT	$30X e^- \Lambda_1 \gamma \Lambda_1$	1.25	850
ONELD		0.12	850
MCNP	nps 100000	143.33	1250

Tabla 5.3: *Tiempos de cálculo de perfil de dosis. nps se refiere a la cantidad de historias.*

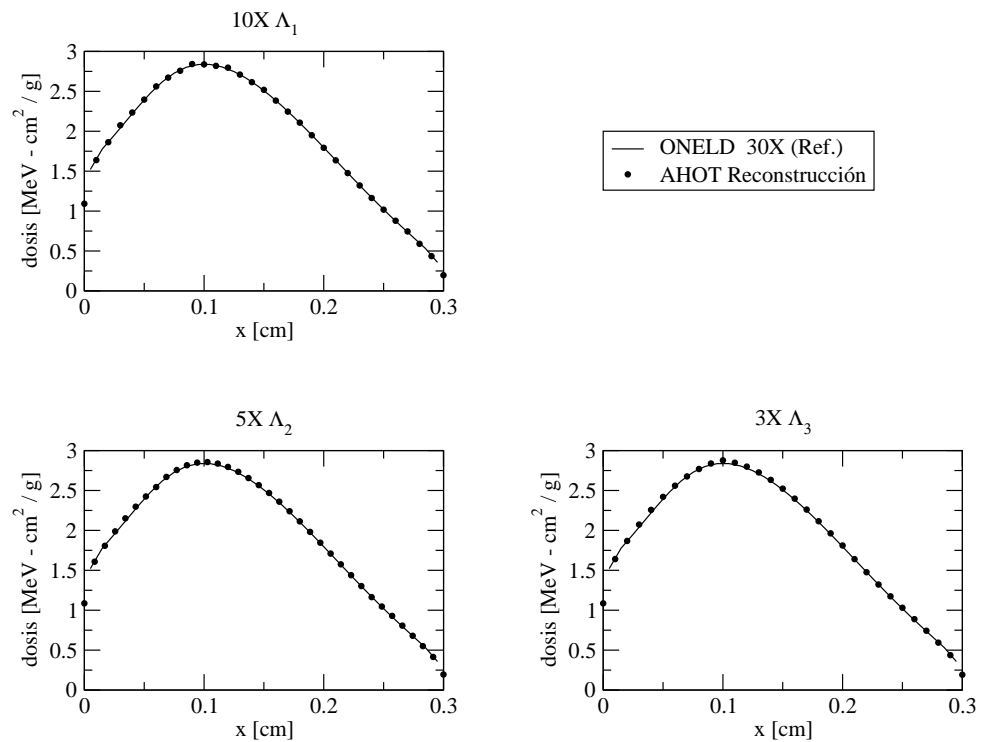


Figura 5.10: *Slab de Cobre. Deposición de energía a partir de flujos reconstruidos con operador CSD de primer orden. La reconstrucción del flujo escalar permite obtener un perfil detallado de dosis aún para una discretización espacial pequeña. Sobre cada gráfica se indica el orden de expansión y la discretización espacial utilizados en el código AHOT.*

Conclusiones sobre la deposición de energía

Se ha observado que la utilización de orden de desarrollo variable por partícula puede utilizarse como forma eficiente de acoplar el cálculo de transporte de electrones y fotones, caracterizados por caminos libres medios muy dispares. La utilización de órdenes elevados para electrones permite computar la deposición de dosis con suficiente precisión, utilizando una malla cerca de 15 veces más “gruesa” que la requerida por el código ONELD.

5.1.3. Deposición de carga

La deposición de carga se define tal que un electrón deposita su carga en una región cuando su energía es inferior a la energía de corte del cálculo. Entonces, la energía de corte, E_{min} , y la discretización espacial cerca de las interfaces juegan un rol más crítico como parámetros de cálculo que en el caso de deposición de energía [27, 43]. La carga depositada se puede computar a partir de la siguiente expresión [14] para un cálculo determinístico acoplado

$$C = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE (\Phi^e(E) \Sigma_c^e(E) - \Phi^p(E) \Sigma_c^p(E)) \quad (5.4)$$

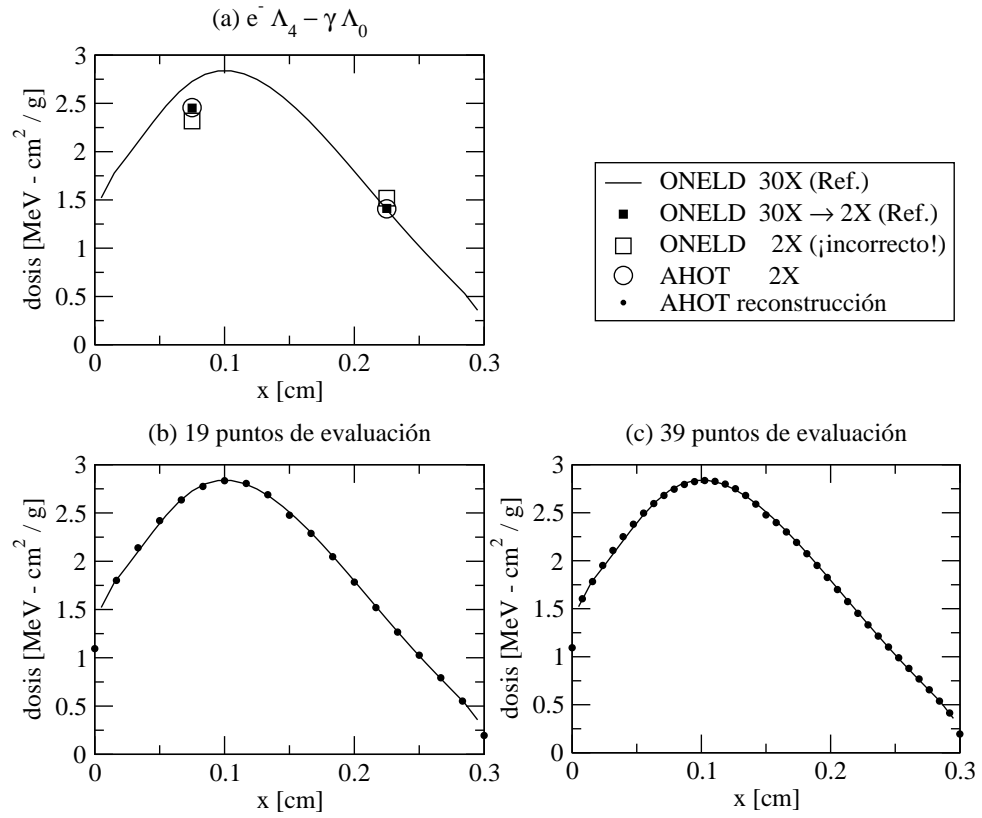


Figura 5.11: Slab de Cobre. Deposition de energía a partir de flujos reconstruidos con operador CSD de primer orden. El uso de alto orden de desarrollo espacial de electrones permite utilizar discretización espacial reducida y, a través de la reconstrucción, recuperar la información del perfil de dosis. En la Fig. (a) se muestra la solución de referencia de ONELD con 30 mallas. Esta solución se condensó a las dos mallas de los restantes cálculos, mostrando que mientras ONELD con sólo dos mallas predice valores medios incorrectos, AHOT no sólo predice valores correctos sino que, a través de la reconstrucción, permite obtener el perfil continuo de dosis. En las Fig. (b) y (c) se muestra que el usuario del código puede definir la cantidad de puntos de evaluación de la reconstrucción.

donde Φ^e y Φ^p son la fluencia de electrones y positrones respectivamente (cm^{-2}). La sección eficaz de *deposición de carga* se define por

$$\begin{aligned} \Sigma_c^e(E) &= \Sigma_t^e(E) - \int_{E_{min}}^E \Sigma^{e \rightarrow e}(E \rightarrow E') dE' - \int_0^E \Sigma^{e \rightarrow \gamma}(E \rightarrow E') dE' \\ \Sigma_c^p(E) &= \Sigma_t^p(E) - \int_{E_{min}}^E \{ \Sigma^{p \rightarrow e}(E \rightarrow E') + \Sigma^{p \rightarrow p}(E \rightarrow E') \} dE' \\ &\quad - \int_0^E \Sigma^{p \rightarrow \gamma}(E \rightarrow E') dE' \end{aligned} \quad (5.5)$$

y se puede interpretar como las interacciones que producen que los electrones o positrones pierdan energía por debajo de la energía de corte. La deposición de carga tiene en cuenta tanto la absorción de electrones primarios como secundarios que fueron

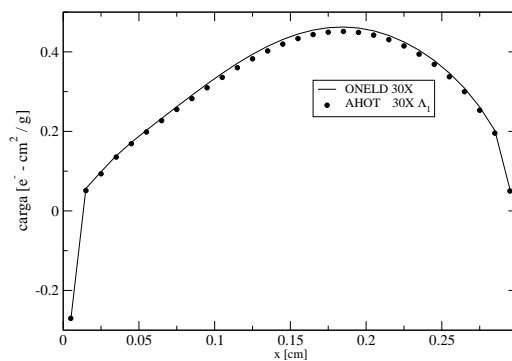


Figura 5.12: Slab de Cobre. Deposición de carga. El método AHOT deprime levemente la deposición de carga respecto del cálculo con el código ONELD.

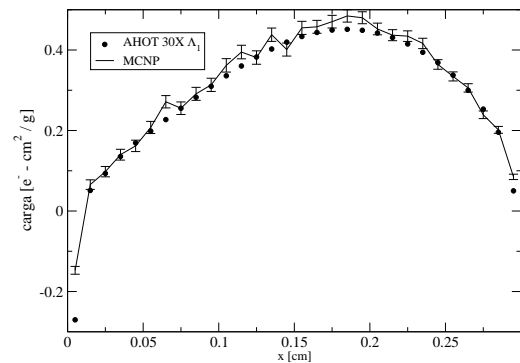


Figura 5.13: Slab de Cobre. Deposición de carga. Los niveles de deposición de carga que predice el método determinístico son comparables a los que resultan de los cálculos estocásticos. Sin embargo, MCNP produce resultados oscilatorios debido, en parte, al efecto numérico de las interfaces de celda.

“transportados” en el cálculo. Téngase en cuenta que esta definición difiere de otras nociones que aparecen en la literatura. Por ejemplo, la densidad de *electrones primarios* absorbidos en el blanco [28] o de las cargas totales generadas en el medio [2]. Por último, nótese que la deposición de carga se define positiva para electrones, de modo que valores negativos representan desprendimiento de electrones del medio o deposición de positrones.

En la Fig. 5.12 se muestra la comparación entre el cálculo de deposición de carga por los códigos ONELD y AHOT (operador CSD2). Se observa que el código AHOT tiende a deprimir la deposición de carga. En la Fig. 5.13 se compara el resultado de AHOT con el de MCNP para 50000 historias e indexación ITS. Las oscilaciones del resultado estocástico se deben, en parte, al artificio numérico que introducen las interfaces de celdas.

5.2. Fantoma de Agua

Como problema de importancia para estudios de radio oncología, se resolvió el transporte de electrones de 20 MeV incidiendo normalmente sobre un fantoma de agua de 12 cm de espesor. Este problema, que se encuentra en la guía de resultados del sistema CEPXS/ONELD [14], se ha convertido en uno de los problemas “benchmark” de los métodos computacionales para este tipo de aplicación [18, 39].

5.2.1. Distribución de dosis

La Fig. 5.14 muestra la comparación en los cálculos determinístico y estocástico. El tipo de indexación energética considerada en el código MCNP resulta ser un parámetro importante para determinar la distribución de dosis [39]. Nuevamente el efecto de la interpolación MCNP demasiado energética permite explicar por qué la dosis resulta corrida en profundidad, ya que los electrones se frenan “tarde”. La energía de corte es de 100 keV en este caso.

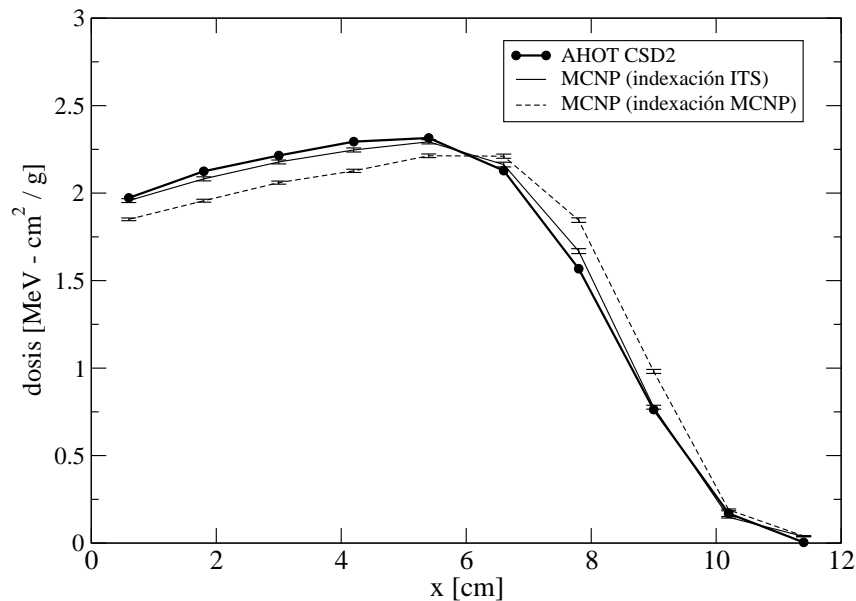


Figura 5.14: Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. Se compara la solución determinística con operador de segundo orden contra la solución de MCNP usando indexación MCNP e ITS. La primera de estas indexaciones produce un corrimiento del perfil de dosis debido al tipo de interpolación de los parámetros de transporte. La indexación ITS produce resultados comparables al tratamiento determinístico.

En la Fig. 5.15.(a) se muestra la distribución de dosis en el slab utilizando el operador de primer orden (CSD1). En la parte (b) de la misma figura se muestra el mismo perfil de dosis pero a partir del algoritmo de reconstrucción comparado con una solución de referencia. Observamos que el método AHOT permite conocer la distribución de dosis, con un detalle equivalente a un mallado cinco veces superior al de un código con el método lineal discontinuo sin reconstrucción. Nótese sobre todo que la reconstrucción permite ver la caída de dosis en la cara izquierda del slab que no queda revelada en el cálculo de 10 mallas.

En la Fig. 5.16 se muestra el perfil de dosis para un cálculo a 2 celdas con orden Λ_4 para electrones y Λ_1 para fotones. La concordancia entre la dosis “reconstruida” y la dosis de referencia muestra que el aumento de precisión del desarrollo espacial permite disminuir drásticamente el número de celdas. Se observa una pequeña caída de la dosis en la interface de celda central. Esta discrepancia se manifiesta como resultado de una

leve oscilación del ajuste de orden cuatro de la dosis dentro de cada celda, debido principalmente al perfil abrupto que presenta en la interface izquierda del slab.

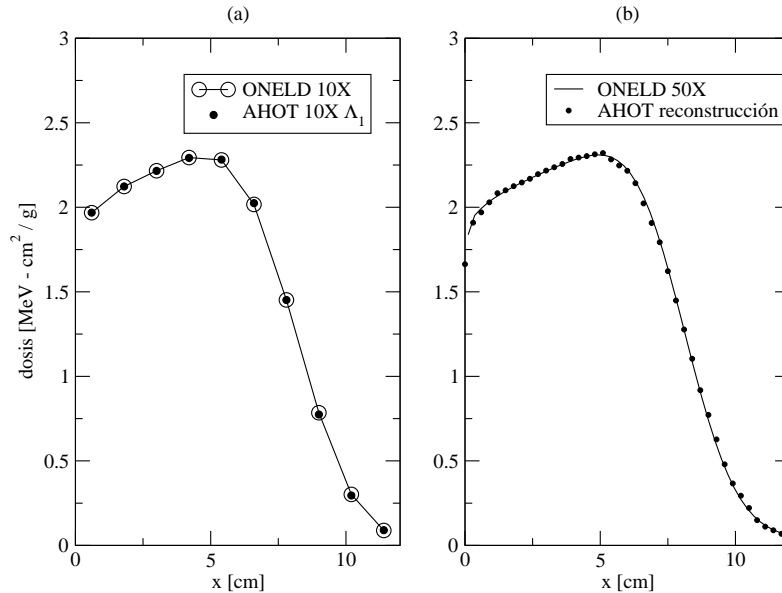


Figura 5.15: Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. En (a) se grafica la distribución de dosis comparandón los códigos determinísticos en su forma base. En (b) se grafica la reconstrucción que permite obtener el cálculo base de AHOT en (a). La reconstrucción permite en el caso del operador CSD de primer orden obtener el detalle del perfil de deposición de energía.

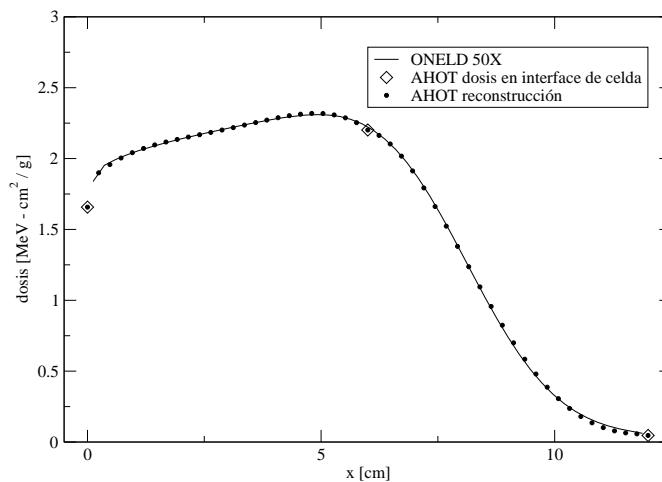


Figura 5.16: Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. El uso de Λ_4 para electrones y Λ_1 para fotones permite trabajar con una discretización espacial de 2 mallas y, a través de a reconstrucción, reproducir el perfil completo de dosis.

5.3. Características del Operador de Moderación de Segundo Orden

Morel et al. han reportado que el uso del operador de frenamiento continuo de segundo orden con mallas muy discretizadas puede derivar en oscilaciones espaciales para haces incidentes de electrones monoenergéticos. Estas oscilaciones se generan en el dominio de la energía con una longitud de onda igual a dos veces el ancho del grupo. Pero debido a que el operador CSD impone una correlación entre la longitud de trayectoria de un electrón y su pérdida de energía, las oscilaciones pueden propagarse al dominio espacial [34]. A esta problemática proponen, por un lado, el uso de mallas no muy finas, en el sentido de que sean más anchas que el trayecto de frenamiento correspondiente al salto energético entre dos grupos adyacentes de electrones.

Específicamente, para una grilla energética uniforme de electrones, recomiendan el uso de la siguiente regla aproximada para evitar oscilaciones espaciales. Media longitud de onda de dichas oscilaciones energéticas es

$$\Delta E_g = E_g - E_{g+1}$$

bajo la hipótesis de frenamiento continuo, esta variación energética corresponde a una variación en la trayectoria

$$\Delta s_g = R(E_g) - R(E_{g+1})$$

dado que el rango de los electrones es aproximadamente lineal en función de la energía

$$\Delta s_g = R(\Delta E_g)$$

y para grupos electrónicos espaciados regularmente

$$\Delta s_g = R(E_1)/G$$

El desplazamiento espacial promedio correspondiente es $v\Delta s_g$ donde v es el cociente entre el vector desplazamiento promedio y el rango CSD. Valores de v están dados en la referencia [36] y por debajo de 1 MeV son aproximadamente independientes de la energía. Para cobre, por ejemplo, $v = 0.3$. Entonces la regla aproximada para que las oscilaciones espaciales no ocurran es que el ancho de malla Δx exceda la trayectoria asociada con las oscilaciones en el dominio de la energía, es decir

$$\Delta x > vR(E_1)/G \quad (5.6)$$

Nosotros encontramos numéricamente que cuando se refina el ancho de malla y se acerca a la condición dada por la Ec. (5.6), la carga comienza a oscilar antes que la dosis. Por otro lado, cuando se cumple la condición, la dosis y la deposición de carga efectivamente no oscilan. Sin embargo, los flujos de electrones todavía pueden presentar oscilaciones, como es el caso de la Fig. 5.17. Esta figura muestra, en el plano espacial y energético, el flujo escalar de electrones en el slab de cobre. Dos cortes a coordenada energética y espacial constantes revelan las oscilaciones energéticas del flujo que se traducen al dominio espacial. Dado que las oscilaciones son de relativa

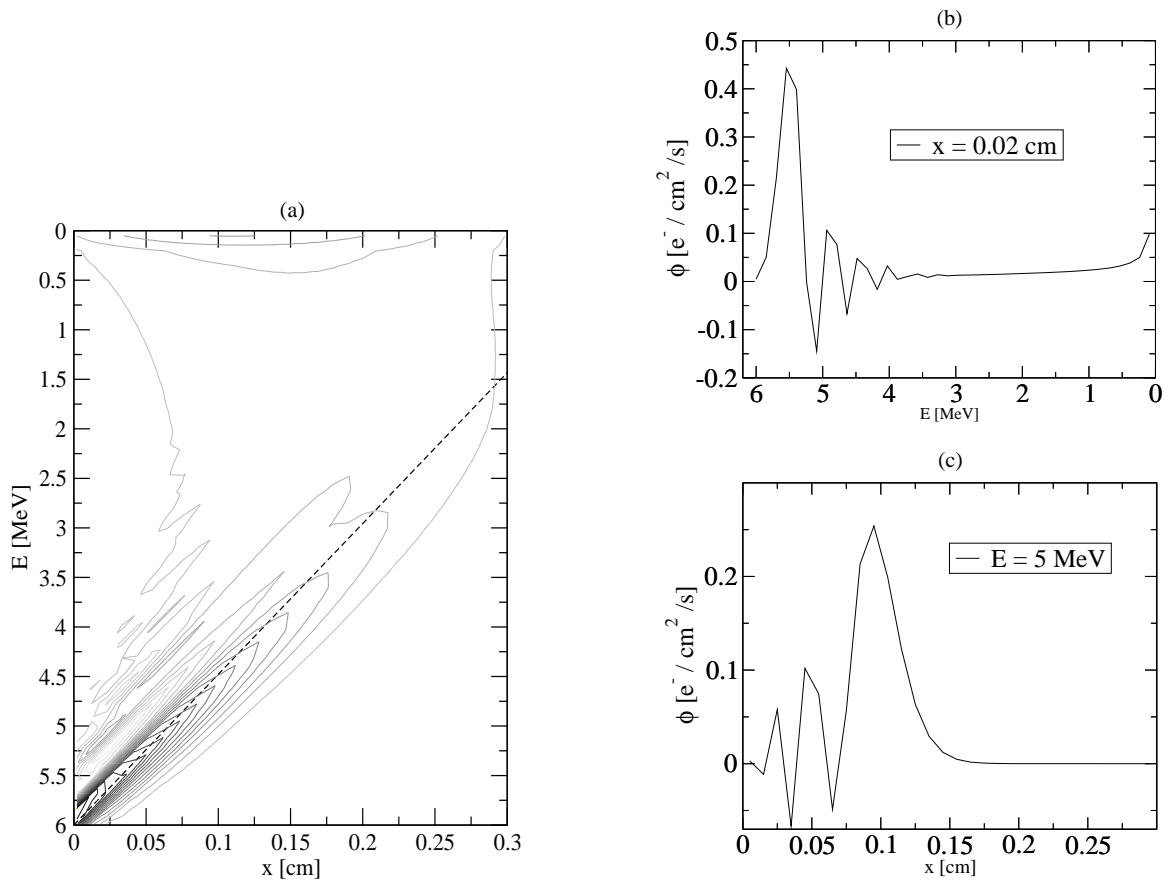


Figura 5.17: Slab de cobre. Haz de electrones de 6 MeV. Oscilaciones energéticas y espaciales del flujo escalar de electrones en el plano xE producidas por el operador de moderación continua de segundo orden. En (a) la línea a trazos grafica la recta $E = -S(E_1)x + E_1$ donde $S(E_1)$ es el poder de frenamiento total de electrones de 6 MeV. Las figuras (b) y (c) muestran cortes de la superficie xE . (b) Muestra las oscilaciones en la coordenada energética que se traducen a la coordenada espacial, mostrada en (c), debido a la correlación que impone el operador de moderación.

alta frecuencia, comparada con la discretización espacial, al computar valores medios de flujo escalar por celda las oscilaciones se cancelan. Creemos que ésta es la causa que motiva que no se pueda utilizar la reconstrucción puntual de los flujos para obtener la distribución de dosis en estos casos, como se observa en la Fig. 5.18.

Por otro lado, cuando no se cumple la condición dada por la Ec.(5.6), las oscilaciones aparecen como se muestran en la Fig. 5.19 para el haz de electrones de 6 MeV incidiendo en cobre. Como modo de estabilizar las oscilaciones, se propuso en este trabajo utilizar orden de desarrollo espacial variable por mallas. En la misma Fig. 5.19 se muestra el resultado sobre la deposición de energía, donde las oscilaciones desaparecen sin detrimento del nivel de dosis. Por su parte, la Fig. 5.20 muestra el cómputo de deposición de carga, donde las oscilaciones se reducen considerablemente con sólo una pérdida del 5% de la carga total depuesta.

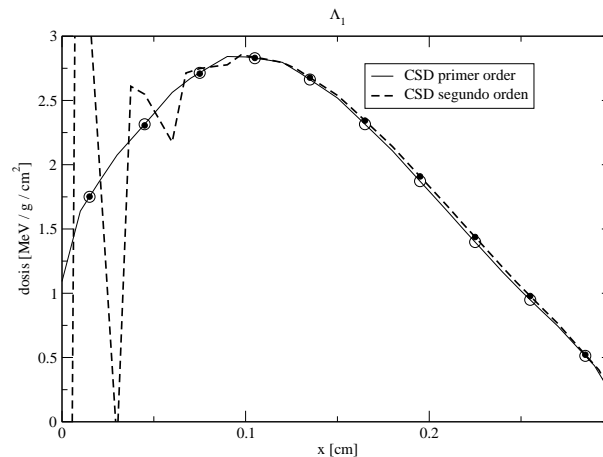


Figura 5.18: Slab de Cobre. Deposición de energía a partir de flujos escalares reconstruidos. Se comparan los valores del algoritmo base y de reconstrucción para las dos aproximaciones del operador CSD: primer orden y segundo orden. El cálculo corresponde a AHOT con 10 mallas y expansión lineal del flujo. En línea continua se muestra la reconstrucción para cada aproximación. El operador de segundo orden provoca oscilaciones en los flujos que se traducen en la deposición de energía puntual, pero que se promedian para dar el resultado correcto de la dosis media por celda (círculos).

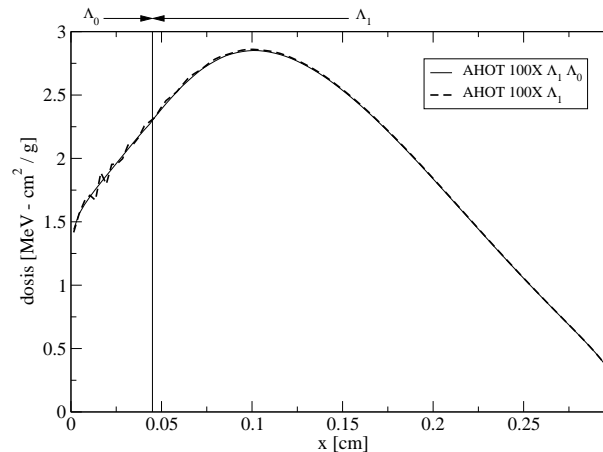


Figura 5.19: Slab de Cobre. Dosis de electrones de 6 MeV. La malla demasiado fina no cumple la condición dada por la Ec. (5.6), por lo que la dosis oscila. Como modo de estabilización se utiliza orden constante cerca de la interfaz izquierda y orden lineal en el resto del dominio.

Recordemos, por último, que las oscilaciones energéticas pueden también aliviarse aumentando la discretización energética. Drumm [18], por su parte, mostró que utilizando la teoría de Goudsmit-Saunderson se pueden computar secciones eficaces menos anisotrópicas, combinando el núcleo de scattering elástico con el de frenamiento continuo, logrando aliviar las oscilaciones energéticas. Pero quizás más importante, logró remendar la fuerte restricción que supone la utilización de cuadraturas que integran exactamente la función delta. De este modo, se pueden utilizar desarrollos de

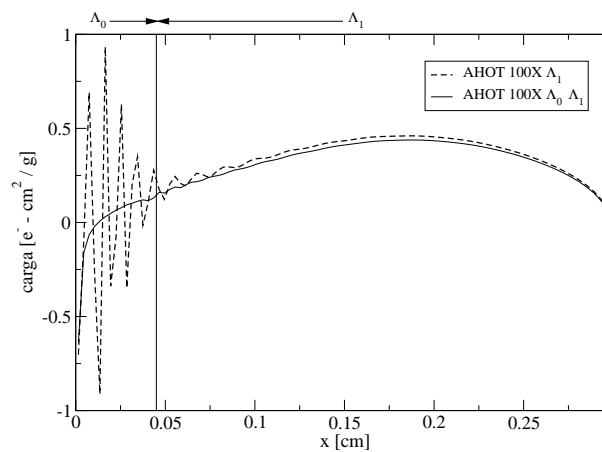


Figura 5.20: Slab de Cobre. Deposición de carga. El orden de desarrollo espacial variable permite estabilizar las oscilaciones.

secciones eficaces con orden 15, por ejemplo, con cuadraturas S_{32} .

5.4. Interfaces

Retomemos el ejemplo que inició este trabajo. Un haz de fotones de 4 MeV incidiendo sobre un slab de agua de 20 cm . Para el cálculo se utilizaron 30 grupos lineales de fotones y 30 de electrones. La energía de corte fue seleccionada en 10 keV . En la introducción mostramos que remallando o utilizando un operador de alto orden era posible resolver el perfil de dosis. Aquí mostramos que combinando ambas técnicas se obtienen resultados muy precisos con poca exigencia de cálculo. Más precisamente, el cálculo de kerma tarda 5.4 segundos y el de dosis 12 segundos. Un resultado alentador considerando que para calcular el kerma sólo se resuelven 30 grupos de fotones y para la dosis se resuelven 60 grupos.

La malla adaptativa fue generada sobre el caso con Λ_1 pidiendo que el nuevo ancho de malla por el error de la micromalla fuese constante para todas las que se encontraban originalmente en una celda homogénea o macromalla. En este caso la macromalla comprendía todo el slab y la discretización era de 10 mallas.

En la Fig. 5.21 se muestra la dosis calculada sobre una malla adaptada con Λ_2 . Se obtiene un perfil de dosis comparable a utilizar un operador de orden 8 sobre una malla uniforme pero tres veces más rápido. En la figura se muestra, esta vez, el kerma total. Dado que la componente del campo de fotones generados por frenamiento de electrones es menor, el kerma y el kerma de colisión son similares. Sin embargo, se cumple que el kerma total es siempre superior a la dosis y el kerma de colisión es inferior a esta dentro del equilibrio transitorio de partículas cargadas.

Con esta combinación de técnicas abordamos un problema de interfaces materiales.

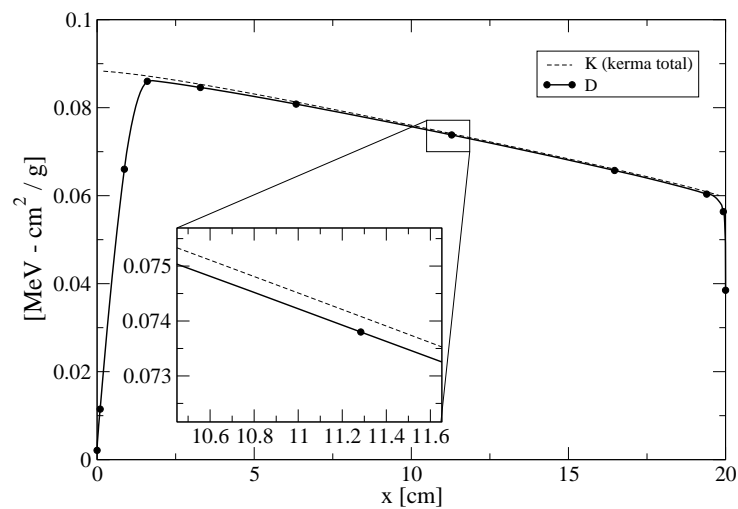


Figura 5.21: Dosis de fotones de 4 MeV en agua. El uso de un operador de discretización espacial cuadrático conjuntamente con la malla adaptada generada con el estimador de error permite resolver eficientemente la dosis. En círculos se remarcan las dosis en interfaces de micromallas mostrando la discretización. En este caso se muestra el kerma total.

5.4.1. Blanco de berilio y tungsteno

La moderna terapia conformacional permite la administración de dosis localizada utilizando haces de sección transversal ajustada a medida que se rota alrededor del volumen del tumor. Las exigencias en la calidad del haz motiva el estudio de blancos multicapa.

En relación a esta aplicación aparece un fenómeno interesante denominado amplificación de la dosis (*dose enhancement*). La traducción puede no ser totalmente acorde pues el sentido del vocablo inglés no se restringe a amplificaciones sino que también puede significar disminución. Y ésta es la naturaleza del fenómeno que se refiere a las diferencias que presenta la dosis en una región del material respecto del valor de "dosis de equilibrio". Se produce por desbalances energéticos en dicha región debido a electrones, producidos por fotones o dispersados, desde o hacia materiales disímiles adyacentes. La dosis de equilibrio es la dosis que se establece en el material original lejos de cualquier interface (más lejos que el rango de los electrones en juego).

Este fenómeno se ha estudiado con transporte determinístico y se ha comparado con experimentos exitosamente [20]. En la Fig. 5.22 se muestra el perfil de dosis en un blanco bicapa de berilio y tungsteno [42]. La interface muestra la discontinuidad característica del fenómeno de amplificación. Para estudiarla partimos de una discretización homogénea en cada material (10 mallas en berilio, 20 en tungsteno) y calculando generamos un malla adaptada que permite resolver los fuertes gradientes. Por ahora, el generador de malla que hemos implementado es todavía rudimentario, trabajando sólo con el error de un grupo energético designado por el usuario y no distribuye óptimamente las mallas. En este caso se eligió trabajar con el grupo menos energético de electrones porque presenta los gradientes más abruptos en las interfaces.

En la Fig. 5.23 se muestra el espectro de fotones salientes del blanco que muestra el

pico característico de 511 keV y la línea de la capa k del tungsteno.

En la aplicación de tratamiento radiante también puede ocurrir amplificación de la dosis en presencia de interfaces. Por ejemplo, los implantes metálicos [10].

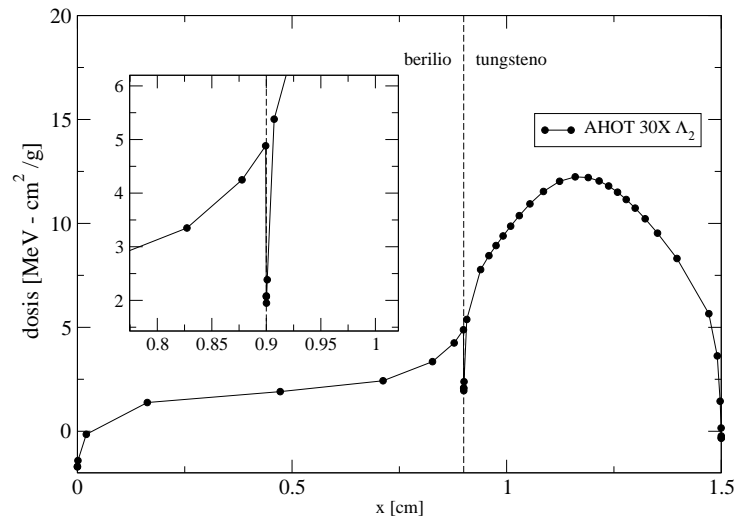


Figura 5.22: Dosis de electrones de 50 MeV en un target bicapa de berilio (0.9 cm) y tungsteno (0.6 cm). El uso del estimador de error para generar mallas refinadas cerca de las interfaces permite resolver adecuadamente los gradientes del perfil de dosis. En el recuadro se muestra el detalle de la discontinuidad material.

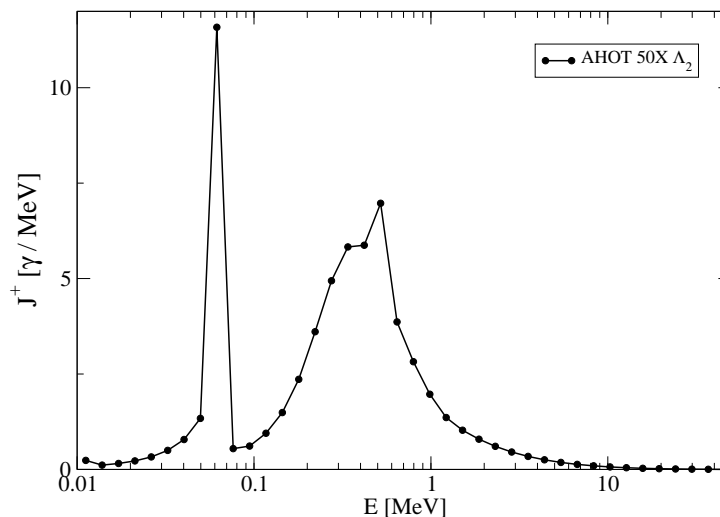


Figura 5.23: Espectro de bremsstrahlung generado por electrones de 50 MeV en un target bicapa de berilio (0.9 cm) y tungsteno (0.6 cm). El cálculo se realizó acoplado electrones positrones y fotones. El espectro muestra los pocos característicos de 511 keV y la línea de la capa k del tungsteno (59.2 keV).

5.5. Conclusiones

La corriente saliente de fotones, el perfil de dosis y el perfil de carga computados tanto por el código ONELD como AHOT discrepan de los calculados con el código MCNP cuando se utiliza indexación MCNP. Los resultados son más concordantes cuando se utiliza indexación ITS. Por su parte, AHOT reproduce los resultados de ONELD. El hecho de que ONELD utiliza un esquema "linear-discontinuous" que es similar a AHOT con orden espacial Λ igual a 1 en cuanto a discretización espacial, hace que los resultados bajo la misma discretización espacial sean equiparables.

Por otra parte, AHOT permite utilizar órdenes de desarrollo espacial mayores e independientes para cada grupo. Así, podemos elegir convenientemente el orden de desarrollo espacial para cada grupo de cada partícula. Por el hecho de que los fotones tienen caminos libres medios muy superiores a los de electrones, en general, el perfil de los flujos dentro del blanco será mucho más suave para fotones que para electrones como se observó en las Fig. 4.12 y 4.13. Por ello se puede elegir un orden de desarrollo Λ_4 para los grupos de electrones y orden Λ_2 o Λ_1 para fotones, por ejemplo. Se observa que con orden 4 para electrones y 2 para fotones se obtienen buenos resultados tanto para el perfil de dosis como para la corriente saliente de fotones con sólo dos mallas espaciales para el operador CSD de primer orden. No sólo se obtienen los valores medios por malla, sino que la reconstrucción de los flujos permite conocer el perfil detallado de dosis.

El operador de segundo orden permite predecir valores medios por celda más exactos para la misma discretización energética, si se cumple que la malla es suficientemente gruesa. Cuando la malla es muy fina, el operador provoca oscilaciones energéticas que se traducen a la coordenada espacial por la correlación que la moderación continua impone entre la pérdida energética y el desplazamiento espacial. Como forma de estabilizar las oscilaciones utilizamos el operador espacial constante en la región donde éstas se establecían.

Por último, se utilizó el estimador de error para generar mallas refinadas localmente que permiten resolver adecuadamente los gradientes espaciales frente a intercaces de materiales disímiles.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se presentó la aplicación del método de AHOT-N (Arbitrary High Order Transport-Nodal) al transporte unidimensional acoplado de electrones y fotones.

Se introdujo la problemática que genera el cálculo simultáneo de partículas cargadas y neutras, necesario para computar magnitudes relevantes como la dosis. En particular, se mostró que el flujo de electrones se caracteriza por fuertes gradientes espaciales frente a interfaces y se presentó al método AHOT como una opción válida para la resolución eficiente del transporte acoplado, a través de dos técnicas que el método incorpora en forma natural. Por un lado, el refinamiento local de malla espacial y, por otro, la utilización de operadores espaciales de diferente orden.

El método de Transporte Nodal se presentó tal cual se utiliza para el caso de fotones o neutrones. Sin embargo, y motivados por las diferencias que presentan los electrones, se revisaron los parámetros del método AHOT y se introdujo un esquema de Aceleración Sintética S_2 . Estas contribuciones dejaron al código en condiciones de tratar partículas cargadas y eficientizaron los cálculos. También se plantearon las expresiones del estimador de error *a posteriori* como una herramienta fundamental para determinar la precisión del cálculo y detectar las zonas con mayor error.

Se citaron los modelos físicos que permiten tener en cuenta las principales interacciones de las partículas con la materia. Se expuso con mayor detalle la generación de secciones eficaces para representar el operador de moderación continua restringido que posibilita la utilización de códigos de ordenadas discretas originalmente pensados para partículas neutras. Este operador determina en forma directa la convergencia energética e indirectamente la convergencia espacial, principalmente para problemas con fuente superficial de electrones.

Se mostró el trabajo de implementación y validación exitosa de la ampliación del código original. Parte del desarrollo implicó la codificación de un solver analítico y utilitarios para leer las bases de datos generadas por el código de secciones eficaces CEPXS.

Con la herramienta de cálculo corroborada, abordamos problemas completos de transporte acoplado. Mostramos que el código AHOT aumenta su eficiencia al utilizar mallas “gruesas”, eligiendo convenientemente para cada partícula operadores espaciales de distintos órdenes.

Comparando resultados determinísticos y estocásticos, se encontró que la indexación energética y la segmentación de tallies son aspectos a tener en cuenta al utilizar el código MCNP para transporte de electrones.

Observamos, por otra parte, que el operador de moderación de segundo orden requiere en general un tratamiento espacial más detallado, debido a la no positividad de las secciones eficaces con los cuales se lo representa. Como esquema de solución alternativo a las oscilaciones espaciales que este operador puede provocar, propusimos utilizar distinto orden de operador espacial por malla.

Por último, mostramos que, utilizando el estimador de error, se pueden generar mallas con refinamiento local cerca de las interfaces, para resolver los gradientes del perfil de dosis.

Pensamos que la combinación ingeniosa de refinamiento de malla y selección de operadores espaciales por partícula es una poderosa técnica para la resolución de problemas acoplados con interfaces. Queda abierta la posibilidad de desarrollar todo el potencial del estimador y estudiar diferentes esquemas de adaptatividad, incluso con orden de desarrollo espacial variable.

Apéndice A

Solución Analítica de la Ecuación de Transporte 1D en la Aproximación SN

Sea la ecuación de transporte monoenergética en una dimensión con scattering desarrollado en polinomios de Legendre hasta orden arbitrario

$$\mu \frac{d\psi^a}{dx} + \mathbf{A}\psi^a(x) = \underline{\mathbf{q}}(x) \quad (\text{A.1})$$

con condiciones de contorno apropiadas. Donde

$\underline{\psi}$ vector de flujos en cada dirección discreta $m = 1, \dots, N$

$\mu = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_N)$ cosenos de las direcciones

$\mathbf{w} = \text{diag}(w_1, \dots, w_N)$ pesos de la cuadratura

$\mathbf{A} = (\Sigma_t(x)\mathbf{I} - \mathbf{S})$

\mathbf{I} matriz identidad de dimensión $N \times N$

$\mathbf{S} = \mathbf{M}\Sigma\mathbf{D}$ matriz de dispersión elástica

$D_{ij} = w_j P_i(\mu_j)$ operador de construcción de momentos angulares

$\Sigma = \text{diag}(\Sigma_{s0}(x), \dots, \Sigma_{sL}(x))$ matriz de momentos angulares de las secciones eficaces de dispersión

$M_{ij} = P_j(\mu_i)$ operador que construye las fuentes angulares a partir de los momentos angulares de la fuente de dispersión

Definimos

$$\mathbf{L} \equiv \mu \frac{d}{dx} + \mathbf{A} \quad (\text{A.2})$$

la Ec. (A.1) se expresa de la siguiente manera

$$\mathbf{L}\underline{\psi}^a = \underline{\mathbf{q}}(x) \quad (\text{A.3})$$

La solución general de la Ec.(A.3) puede expresarse en cada celda C_k donde las secciones eficaces y la fuente externa son constantes, como la suma de una solución particular más una homogénea, es decir,

$$\underline{\psi}^a = \mathbf{A}^{-1}\underline{\mathbf{q}} + \{\underline{\psi}_h^a(x)/\mathbf{L}\underline{\psi}_h^a(x) = 0\} \quad x \in C_k \quad (\text{A.4})$$

La solución homogénea, $\underline{\psi}_h^e$, está en un espacio de dimensión N , por lo que es suficiente encontrar la base del mismo. Para ello, utilizamos el método de separación de variables, de forma similar al análisis espectral dado en [13]. Sea

$$\underline{\psi}_h^a = \underline{v}(\nu) e^{\Sigma_t x / \nu} \quad (\text{A.5})$$

la solución de la ecuación homogénea. Entonces

$$\mathbf{L}\underline{v}(\nu) e^{\Sigma_t x / \nu} = 0 \quad (\text{A.6})$$

Operando con la definición de L obtenemos la siguiente ecuación de autovalores

$$\mu^{-1}(\mathbf{S} - \mathbf{I})\underline{v} = \frac{1}{\nu}\underline{v} \quad (\text{A.7})$$

Obteniendo los autovectores la solución general queda expresada por

$$\underline{\psi}^a = \mathbf{A}^{-1}\underline{q} + \sum_i^N C_i \underline{v}(\nu_i) e^{\Sigma_t x / \nu_i} \quad (\text{A.8})$$

Las constantes C_i se determinan con las condiciones de contorno para las celdas exteriores del sistema y con la continuidad de $\underline{\psi}^a$ en las interfaces de materiales.

Apéndice B

Positividad del Flujo para Orden de Desarrollo Espacial Constante

Se puede demostrar la positividad del flujo escalar para orden de desarrollo espacial cero o constante, con scattering isotrópico, con cuadraturas de pesos positivos. El momento cero del flujo en la dirección m para orden de desarrollo espacial constante Λ_0 se deduce de las Ec.(2.13) y (2.15) y puede expresarse como

$$\psi_m(0, k) = \frac{1}{t_{mk}(\alpha_{mk} + 1 + 1/t_m)} \psi_m(x_{k\mp 1/2}) + \frac{\alpha_{mk} + 1}{\alpha_{mk} + 1 + 1/t_{mk}} (c\phi_0(0, k) + q_m(0, k)/\Sigma_{tk}) \quad (\text{B.1})$$

donde $t_m = \Sigma_{tk} h_k / (2|\mu_m|)$, $c = \Sigma_s / \Sigma_t$ y \mp se elije de acuerdo al signo de μ_m para obtener el flujo entrante a la celda. Simplificando la notación y utilizando la cuadratura para obtener el flujo escalar

$$\phi = \phi_0(0, k) = \sum_{m=1}^N w_m \psi_m(0, k) \quad (\text{B.2})$$

$$\phi = \sum_{m=1}^N w_m \frac{1}{t_m(\alpha_m + 1 + 1/t_m)} \psi_m(x_{\mp 1/2}) + \sum_{m=1}^N w_m \frac{\alpha_m + 1}{\alpha_m + 1 + 1/t_m} (c\phi + q_m/\Sigma_t) \quad (\text{B.3})$$

despejando ϕ

$$\phi \left(1 - c \sum_{m=1}^N w_m \frac{\alpha_m + 1}{1 + \alpha_m + 1/t_m} \right) = \sum_{m=1}^N w_m \frac{1}{t_m(\alpha_m + 1 + 1/t_m)} \psi_m(x_{\mp 1/2}) + \sum_{m=1}^N w_m \frac{\alpha_m + 1}{\alpha_m + 1 + 1/t_m} q_m/\Sigma_t \quad (\text{B.4})$$

Si el término de la izquierda es positivo, la positividad del flujo queda asegurada si

$$\left(1 - c \sum_{m=1}^N w_m \frac{\alpha_m + 1}{1 + \alpha_m + 1/t_m} \right) > 0 \quad (\text{B.5})$$

Dado que $c < 1$, los pesos $\alpha = (\cosh(t_m) - \sinh(t_m)/t_m)/\sinh(t_m)$ son positivos y los pesos de la cuadratura pedimos que sean positivos y sumen uno, la condición se satisface inmediatamente pues $t_m > 0$ entonces

$$\frac{\alpha_m + 1}{\alpha_m + 1 + 1/t_m} < 1 \tag{B.6}$$

En el caso de que $t_m = 0$ corresponde a vacío y el flujo escalar también resulta positivo.

Nos queda, por tanto, ver bajo que condiciones el término de la izquierda de la Ec.(B.4) es positivo. Para ello analizamos por separado la contribución de la fuente externa y de los flujos entrantes pues pueden ser fijados independientemente. Pero queda claro que es suficiente que tanto la evaluación del momento cero de la fuente en cada uno de los puntos de la cuadratura como los flujos entrantes sean positivos para que dicho término sea positivo.

Ahora bien, hemos demostrado que sienta los flujos entrantes a una celda y la fuente externa en los puntos de cuadratura positivos el flujo escalar será positivo. Solo queda mostrar que el flujo saliente es positivo usando la siguiente ecuación

$$\psi_m(x_{k\pm 1/2}) = \psi_m(x_{k\mp 1/2})e^{-2t} + \frac{1}{|\mu_m|}(\psi_m(0, k) + q_m(0, k)) \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} e^{-\Sigma_t/|\mu_m|(x_{k+1/2}-x')} dx' \tag{B.7}$$

dado que la integral es positiva.

Aplicando recursivamente el razonamiento sobre todas las celdas del dominio llegamos inductivamente a que la condición sobre los flujos entrantes se reduce a pedir condiciones de borde positivas para cada una direcciones entrantes en ambas caras del dominio. Extendiendo el requerimiento sobre la fuente externa a todas las celdas queda asegurada la positividad del flujo escalar medio por malla con lo cual concluye la demostración.

Esta propiedad puede tener utilidades como método de fix-up de alta precisión dado que se trata de un operador de orden h^2 en el flujo escalar. Aunque hemos visto su utilidad en el transporte de partículas cargadas al aliviar las oscilaciones espaciales producidas por el operador de frenamiento continuo de segundo orden, la positividad del flujo no puede ser asegurada porque existen secciones eficaces negativas con este operador y porque no sabemos de la generalidad del resultado para anisotropías arbitrarias. Sin embargo, la experiencia nos sugiere que utilizando el operador de primer orden que asegura la positividad de las secciones eficaces y procurando usar el método " $S_N P_{N+1}$ " los resultados de los flujos serán positivos.

Bibliografía

- [1] A. F. Albornoz. Análisis de la dosimetría ex-vessel de CNA1. Inf. Tec. 47/009/03, CNEA-CAB, 2003.
- [2] F. H. Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Adison Wesley, 1986.
- [3] Y. Y. Azmy. Weighted Diamond-Difference Form of Nodal Transport Methods. *Nuc. Sci. Eng.*, 98:29–40, 1988.
- [4] Y. Y. Azmy y O. M. Zamonsky. Thin Cell Limit for the Spacial Weights of the Arbitrary High Order Transport-Nodal Method. *Am. Nuc. Sc.*, 78:130, 1998.
- [5] Y. Y. Azmy, O. M. Zamonsky y C. J. Gho. Error Estimation and Adaptative Order Nodal for Solving Multidimensional Transport Problems. En *Proc. of the 1998 Radiation Protection and Shielding Division Topical Conference*, pp. I. 457–I.464, Nashville, USA, 1998.
- [6] Y. Y. Azmy, G. C. Buscaglia y O. M. Zamonsky. A Posteriori Error Estimation for One-Dimensional Arbitrary High Order Transport-Nodal Method. *Ann. Nuc. Eng.*, 27(4):355–369, 1999.
- [7] Y. Y. Azmy, G. C. Buscaglia y O. M. Zamonsky. Improving the Accuracy of High-Order Nodal Transport Methods. En *Proc. of the Internatinal Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Enviromental Analysis in Nuclear Applications*, pág 1598, Madrid, Septiembre 1999.
- [8] M. J. Berger. Monte Carlo Calculation and Diffusion of Fast Charged Particles. En M. Rotemberg B. Alder, S. Fernbach, Eds., *Methods in Comput. Phycs.*, Vol. 1. Academic Press, New York, 1963.
- [9] M. J. Berger y S. M. Seltzer. *Phys. Rev.*, 2:621, 1970.
- [10] T. Berger y N. Vana. Measurements of the dose enhancement at the border between metals and tissue equivalent material. Agosto 1999.
- [11] H. J. Bhabba. En *Proc. Royal Soc.*, Vol. 195, 1936.
- [12] F. Biggs y R. Lighthill. Analytical Aproximations for X-ray Cross Sections III. [14].
- [13] K. M. Case y P. F. Zweifel. *Linear Transport Theory*. Adison Wesley, 1967.

- [14] CEPXS/ONELD, ONE-dimensional Coupled Electron-Photon Multigroup Discrete Ordinate Code System. Número CCC-544 in RSICC computer Code Collection. Radiation Shielding Information Center, ORNL, Diciembre 1992.
- [15] C. M. Davisson y R. D. Evans. *Rev. of Modern Phys.*, 24:79, 1952.
- [16] C. Devillers. System ANISN: Description et Mode de Utilization du programme aux Ordonnées Discrètes ANISN et des Programmes Auxiliaires. Número CEA-N-1358. CEA, 1970.
- [17] Doors 3.2. RSICC Computer Code Collection. ORNL, Tennessee, 1998.
- [18] C. R. Drumm. Multidimensional Electron-Photon Transport with Standard Discrete Ordinate Codes. *Nuc. Sci. Eng.*, 127:1–21, 1997.
- [19] W. W. Engle, Jr. ANISN: A One-dimensional Discrete Ordinate Transport Code. Número CCC-82 in RSICC. ORNL, 1967. modificado por Slater C. O., 1993.
- [20] J. R. Turetti y D. E. Beutler J. C. Garth, K. L. Critchfield. A comprehensive comparison of cepxs/oneld calculations of dose enhancement with co-60 data set of wall and burke. *IEEE Trans. Nuc. Eng.*, 43:2731, 1996.
- [21] Grynsinski. *Phys. Rev.*, 138:A322, 1964.
- [22] J. A. Halbleib, Sr., T. A. Melhorn, M. J. Berger et al. ITS: the Integrated TIGER Series of Couple Electron/Photon Monte Carlo Transport Code-Version 3.0. *IEEE Trans. Nuc. Sci.*, 39:1025–1030, 1992.
- [23] Stopping Power for Electrons and Positrons. Vol. Report 37 de ICRU. International Commission on Radiation Units and Measurement, 1984.
- [24] R. Jeraj et al. Comparison Between MCNP, EGS4 and Experiment for Clinical Electron Beams. *Med. Phys. Bio.*, 44:705–717, 1999.
- [25] H. Kolbenstvedt. *J. Appl. Phys.*, 38:4785, 1967.
- [26] L. J. Lorence, Jr., J. E. Morel y E. W. Larsen. An S_2 Synthetic Acceleration Scheme for the One-Dimensional S_n Equations with Linear Discontinuous Spatial Differencing. *Nuc. Sci. Eng.*, 101:341, 1989.
- [27] V. Lazurik y V. Moskvin. Charge Deposition in Targets irradiated by Electrons. *IEEE Trans. Nuc. Sci.*, 44(3):1065, 1997.
- [28] V. Lazurik y V. Moskin. Absorption of Fast Electron in Thin Slabs. *IEEE Trans. Nuc. Sci.*, 44(3), 1997.
- [29] E. E. Lewis y W. F. Miller, Jr. *Computational Methods of Neutron Transport*. Addison Wesley, New York, 1984.
- [30] P. Marmier y E. Sheldon. *Physic of Nuclie and Particle*, Vol. 1. Academic Press, 1969.

- [31] Monte Carlo N-Particle Transport Code System . Número CCC-700 in RSICC. ORNL, 2000.
- [32] J. E. Morel. On the Validity of the Extended Transport Correction for Low-Energy Electron Transport. *Nuc. Sci. Eng.*, 71:64, 1980.
- [33] J. E. Morel. Fokker-Planck Calculation Using Standar Discrete Ordinates Transport Code. *Nuc. Sci. Eng.*, 79:340–356, 1981.
- [34] J. E. Morel. Multigroup Legendre Coefficients for the Diamond Difference Continuous Slowing Down Operator. *Nuc. Sci. Eng.*, 94:324–331, 1985.
- [35] J. E. Morel. A Hybrid Collocation-Galerkin- S_n Method for Solving the Boltzman Transport Equation. *Nuc. Sci. Eng.*, 27:190, 1989.
- [36] R. D. O'Dell et al. Revised User's Manual for ONEDAT: A Code Package for ONE-dimensional, Diffusion-Accelerated, Neutral-Particle Transport. [14].
- [37] M. E. Riley, C. J. MacCallum y F. Biggs. *Atomic Data and Nuclear Tables*, 15:443, 1975.
- [38] Sandyl. Technical Report SLL-74-0012, Sandia national Laboratory, 1974.
- [39] D. R. Schaart et al. A comparison of MCNP4C Electron Transport and Experiment at Incident Energies Between 100 keV and 20 MeV: Influence of Voxel Size, Substeps and Energy Indexing Algorithm. *Med. Phys. Bio.*, 47:1459–1484, 2002.
- [40] J. V. Siebers et al. Comparison of EGS4 and MCNP4b Montecarlo Codes for Generation of Photon Phase Space Distributions for a Varian 2100C. *Med. Phys. Bio.*, 44:3009, 1999.
- [41] Sternheimer R. M. *Phys. Rev.*, 103:511, 1956.
- [42] R. Svensson y Anders Brahme. Effective source size, yield and beam profile from multi-layered bremsstrahlung targets. 41:1353–1379, 1996.
- [43] T. Tabata, P. Andreo y R. Ito. Depth Profile of Charge Deposition by 0.1 to 100-MeV Electrons in Elemental Asorbers. *Nuc. Instr. and Meth. B*, 94:103–106, 1994.
- [44] M. L. Williams y E. Sajo. Deterministic Calculations of Photon Spectra for Clinical Accelerator Targets. *Med. Phys.*, 29(6):1019, 1967.
- [45] O. M. Zamonsky. , *Estimación de Errores y Aumento de Precisión en Métodos Nodales de Transporte*. tesis doctoral, Instituto Balseiro, 2000.

Índice de Figuras

1.1.	<i>Un haz plano de fotones de 4 MeV de intensidad unitaria incide en forma normal sobre un fantoma de agua. La discretización espacial que permite calcular la curva de kerma, no es suficiente para resolver la deposición de energía. El recuadro remarca que la solución es continua y no es lineal a trozos.</i>	4
1.2.	<i>Dosis de fotones de 4 MeV en agua. Un refinamiento local de la malla permite resolver el perfil de dosis pero la resolución espacial necesaria es excesiva para las partículas neutras.</i>	5
1.3.	<i>El uso de un operador de discretización espacial de mayor orden permite resolver sobre una malla "gruesa" el campo de fotones y electrones. El recuadro muestra que en este caso de equilibrio transitorio de partículas cargadas, la dosis es paralela al kerma de colisión. (\bar{x} se define en el texto)</i>	5
2.1.	<i>Coeficientes de peso en función del parámetro t para distintos órdenes de desarrollo espacial del flujo. Se comparan los cálculos Recursivos y integración de Simpson con 10000 pasos de integración en el rango $t \in [1, 10]$.</i>	15
2.2.	<i>Coeficientes de peso en la región asintótica. Se grafica la zona de iniciación de las oscilaciones de los cálculos de Simpson y Recursivo. Se observa que la regla de Simpson resulta mucho más estable que el cálculo Recursivo.</i>	16
2.3.	<i>t_{lim} vs. Λ para el cálculo Recursivo y regla de Simpson. t_{lim} representa el límite por debajo del cual estas formas de cálculo no permiten obtener los coeficientes de peso α. Con flechas se indican los intervalos de validez de cada cálculo para $\Lambda = 10$.</i>	16
2.4.	<i>Coeficientes de peso para parámetro t elevado. La regla de Simpson arroja resultados indeterminados para $t > 800$. La regla Recursiva permite el cálculo de α aún para el límite $\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha = 1$.</i>	17
2.5.	<i>Coeficientes de peso para un cálculo de transporte acoplado de electrones y fotones en cobre. El caso pone en evidencia la amplitud de rangos de t para cálculos de partículas cargadas y neutras.</i>	18
2.6.	<i>Flujos escalares reconstruidos para una fuente isotrópica de fotones de 511KeV distribuida uniformemente en el músculo con condición de borde de reflexión en la cara derecha. $\tilde{\phi}$ es más fácil de evaluar pero ϕ es continua en x.</i>	19

2.7.	<i>Estimador de error a posteriori para una fuente isotrópica de fotones de 511KeV distribuida uniformemente en el músculo con condición de borde de reflexión en la cara derecha. El estimador de error local, siguiendo el comportamiento del error real, permite conocer qué celdas tienen mayor error.</i>	20
2.8.	<i>Aumento de eficiencia aplicando aceleración a un problemas de convergencia lenta. En la Fig.(a) se registra el número de iteraciones interiores y el tiempo de cálculo de un problema monoenergético en función del espesor del slab. En la Fig.(b) se muestra la variación porcentual de las iteraciones y el tiempo al utilizar la aceleración.</i>	24
2.9.	<i>Aumentar el criterio de convergencia interno disminuye las iteraciones exteriores pero no disminuye el tiempo. La aceleración disminuye las iteraciones exteriores y el tiempo.</i>	25
3.1.	<i>Indexación Energética del código MCNP. El diagrama esquematiza las dos formas de interpolación de datos de secciones eficaces. A los electrones con energías en la zona rayada se les asigna los parámetros de transporte a la energía E_n. ($E_n > E_{n+1}$).</i>	34
4.1.	<i>Principales rutinas dentro de cada bloque del programa AHOT.</i>	37
4.2.	<i>Esquema de cálculo del iteraciones exteriores.</i>	37
4.3.	<i>Esquema de cálculo del iteraciones interiores con o sin aceleración. . . .</i>	38
4.4.	<i>Slab de Agua (espesor 20 cm). Corriente unitaria de fotones de 1.25 MeV sobre la cara izquierda. Los resultados de los códigos AHOT son concordantes con la solución analítica, validando la implementación del núcleo de scattering anisotrópico La Fig.(b) se muestra que el error de AHOT es notoriamente inferior al de ANISN con el mismo criterio de convergencia ($\epsilon_{in} = 1e - 6$).</i>	39
4.5.	<i>Slab de Aluminio (espesor 1.5cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV en la frontera izquierda. La anisotropía de flujo requiere el uso de una cuadratura elevada S_16. El resultado muestra que el método nodal (AHOT) es más preciso que diferencias finitas (ANISN).</i>	40
4.6.	<i>Slab de Aluminio (espesor 1.5 cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV. Los cálculos con mayor orden de desarrollo espacial Λ y menor discretización X dan flujos que coinciden con los valores medios de los cálculos con mayor discretización. Es decir, los balances de partículas se alcanzan con la misma precisión.</i>	41
4.7.	<i>Slab de Aluminio (espesor 1.5 cm) sobre el que incide una corriente de electrones de 6 MeV. Los cálculos con distinto orden de desarrollo espacial Λ y discretización espacial X son "equivalentes" ya que la reconstrucción del flujo permite conocer el perfil cerca de la interface con la misma precisión respecto de la solución analítica. Nótese que la escala espacial logarítmica muestra el sólo el primer milímetro del slab.</i>	41

4.8.	<i>Slab de tejido muscular y hueso (composiciones ICRP) con una fuente isotrópica de fotones de 511 keV uniformemente distribuida en el músculo de 3 cm de espesor que rodea al hueso (slab de 3 cm). En (a) se grafica la solución para el flujo de fotones para el código AHOT, ANISN y Analítico con condición de reflexión en la cara derecha. En (b) se muestra la diferencia entre el flujo medio por malla de los códigos con aproximación espacial y la solución analítica.</i>	43
4.9.	<i>Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). Scattering anisotrópico hasta orden 3 y cuadratura S_2. La condición de contorno en el código ANISN se simula con una fuente direccional en una celda micrométrica sobre la interface izquierda del slab. La correspondencia entre los flujos valida la implementación de la aproximación multigrupo en el código AHOT.</i>	44
4.10.	<i>Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). Se grafican los flujos escalares medios en cada malla. La mayor precisión de la aproximación espacial del código AHOT se ve reflejada en que aproxima mejor la solución de referencia. La solución de referencia ANSIN100X \rightarrow 10X se generó homogeneizando en 10 mallas los flujos medios correspondientes a una corrida con 100 mallas.</i>	45
4.11.	<i>Corriente de neutrones rápidos sobre un slab de agua pesada (espesor 50 cm). El código AHOT no sólo permite obtener flujos medios más precisos con menor cantidad de mallas que un código de diferencias finitas, sino que el algoritmo reconstructor permite reproducir el perfil de flujos escalares puntuales emulando, en este sentido, la información de una corrida de una mayor densidad de mallas.</i>	45
4.12.	<i>Slab de cobre (epesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV incide normalmente en la cara izquierda. Se resuelve el problema acoplado en el cálculo los fotones utilizando el método $P_{15} S_{16}$. En (a) se muestran flujos medios por malla para electrones con $E \in [5.94 \text{ MeV}, 6.00 \text{ MeV}]$ correspondientes a diferentes discretizaciones espaciales y orden de desarrollo espacial para electrones. En (b) se muestran flujos puntuales reconstruidos que evidencian que el aumento de orden permite seguir describiendo el gradiente de flujo, salvo por una leve oscilación para los polinomios de mayor orden.</i>	46
4.13.	<i>Slab de cobre (epesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV inciden normalmente en la cara izquierda. Las diferentes curvas corresponden a diferentes discretizaciones espaciales y orden de desarrollo espacial para electrones. Se mantiene el orden lineal de desarrollo espacial del flujo de fotones sin pérdida de precisión en las cantidades integrales. (a) Se muestra el flujo medio por malla para fotones con $E \in [179 \text{ keV}, 246 \text{ keV}]$. (b) Se muestra la superposición de flujos puntuales reconstruido para la misma energía.</i>	47

4.14. Slab de cobre (espesor 3 mm). Corriente unitaria de electrones de 6 MeV inciden normalmente en la cara izquierda. Se resuelve el problema acoplado en el cálculo los fotones. La disminución de la discretizaciones espaciales y el aumento de orden de desarrollo espacial sólo para electrones permiten disminuir el tiempo de cálculo sin pérdida de precisión en las cantidades integrales (dosis, espectros salientes). El cómputo de tiempo tiene en cuenta el preprocesamiento y resolución del algoritmo base.	47
5.1. Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT reproduce los resultados de ONELD, para la misma discretización espacial con órdenes de desarrollo espacial superiores a cero. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento continuo de segundo orden (CSD2).	49
5.2. Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT reproduce los resultados de ONELD, incluso para discretizaciones espaciales inferiores, aumentando convenientemente el orden de desarrollo espacial de las partículas. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento continuo de primer orden (CSD1).	50
5.3. Slab de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes. AHOT permite seleccionar órdenes de desarrollo espacial independientes para cada partícula, de modo de obtener la convergencia con un número bajo de mallas. Para este cálculo se utilizó el operador de frenamiento de segundo orden (CSD2).	50
5.4. Slabs de Cobre. Corriente saliente de fotones. Se compara el resultado del modelo determinístico con cálculos estocásticos con diferente indexación energética. La indexación ITS resulta más concordante con el modelo determinístico y la discrepancia de la indexación MCNP se explica en función del efecto que ésta produce sobre la interpolación de parámetros de transporte.	51
5.5. La diferencia entre la corriente predicha por el modelo determinístico y estocástico cae prácticamente dentro de la banda de error, en el caso de indexación ITS con 25000 historias. El método determinístico y la indexación MCNP difiere más que el error estadístico. Obsérvese el altísimo error porcentual de MCNP a bajas energías, debido a que se trata de eventos poco probables.	51
5.6. Slabs de Cobre. Corriente parcial de fotones salientes para diferentes espesores de slabs. El aumento de espesor redundante en una pérdida de eficiencia de conversión en radiación de frenamiento con un endurecimiento del espectro por absorción de fotones en el blanco. Utilizado en el cálculo determinístico el operador de segundo orden (CSD2), la concordancia con el código estocástico utilizando indexación ITS es buena. .	52

5.7. Slab de Cobre (espesor 3 mm). Corriente parcial de fotones salientes para diferentes energías incidentes de electrones. Al aumentar la energía de los electrones, aumenta la energía convertida. Pero la eficiencia de conversión se deteriora, dado que el rango de los electrones aumenta y éstos escapan del target. Los cálculos determinísticos fueron evaluados con dos mallas (2X) y con orden espacial de desarrollo Λ_4 para electrones y Λ_2 para fotones.	53
5.8. Slab de Cobre (espesor 3 mm). Deposición de energía de electrones de 6 MeV. Se comparan el resultado determinístico con cuadratura S_{16} con un cálculo estocástico corrido con MCNP usando indexación energética MCNP. En este último se corrieron 100000 historias para mostrar que la discrepancia no se debe a errores estocásticos sino al tipo de interpolación de las secciones eficaces.	55
5.9. Slab de Cobre (espesor 3 mm). Deposición de energía de electrones de 6 MeV. Se comparan los resultados determinísticos con un cálculo estocástico corrido con MCNP con indexación energética ITS. La concordancia de resultados es mejor. El recuadro muestra que un aumento de discretización angular a S_{32} permite reproducir la condición de contorno de haz plano con incidencia normal.	56
5.10. Slab de Cobre. Deposición de energía a partir de flujos reconstruidos con operador CSD de primer orden. La reconstrucción del flujo escalar permite obtener un perfil detallado de dosis aún para una discretización espacial pequeña. Sobre cada gráfica se indica el orden de expansión y la discretización espacial utilizados en el código AHOT.	58
5.11. Slab de Cobre. Deposición de energía a partir de flujos reconstruidos con operador CSD de primer orden. El uso de alto orden de desarrollo espacial de electrones permite utilizar discretización espacial reducida y, a través de la reconstrucción, recuperar la información del perfil de dosis. En la Fig. (a) se muestra la solución de referencia de ONELD con 30 mallas. Esta solución se condensó a las dos mallas de los restantes cálculos, mostrando que mientras ONELD con sólo dos mallas predice valores medios incorrectos, AHOT no sólo predice valores correctos sino que, a través de la reconstrucción, permite obtener el perfil continuo de dosis. En las Fig. (b) y (c) se muestra que el usuario del código puede definir la cantidad de puntos de evaluación de la reconstrucción.	59
5.12. Slab de Cobre. Deposición de carga. El método AHOT deprime levemente la deposición de carga respecto del cálculo con el código ONELD.	60
5.13. Slab de Cobre. Deposición de carga. Los niveles de deposición de carga que predice el método determinístico son comparables a los que resultan de los cálculos estocásticos. Sin embargo, MCNP produce resultados oscilatorios debido, en parte, al efecto numérico de las interfaces de celda.	60

5.14. Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. Se compara la solución determinística con operador de segundo orden contra la solución de MCNP usando indexación MCNP e ITS. La primera de estas indexaciones produce un corrimiento del perfil de dosis debido al tipo de interpolación de los parámetros de transporte. La indexación ITS produce resultados comparables al tratamiento determinístico.	61
5.15. Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. En (a) se grafica la distribución de dosis comparando los códigos determinísticos en su forma base. En (b) se grafica la reconstrucción que permite obtener el cálculo base de AHOT en (a). La reconstrucción permite en el caso del operador CSD de primer orden obtener el detalle del perfil de deposición de energía.	62
5.16. Slab de Agua (espesor 12 cm). Haz plano de electrones de 20 MeV. El uso de Λ_4 para electrones y Λ_1 para fotones permite trabajar con una discretización espacial de 2 mallas y, a través de la reconstrucción, reproducir el perfil completo de dosis.	62
5.17. Slab de cobre. Haz de electrones de 6 MeV. Oscilaciones energéticas y espaciales del flujo escalar de electrones en el plano xE producidas por el operador de moderación continua de segundo orden. En (a) la línea a trazos grafica la recta $E = -S(E_1)x + E_1$ donde $S(E_1)$ es el poder de frenamiento total de electrones de 6 MeV. Las figuras (b) y (c) muestran cortes de la superficie xE . (b) Muestra las oscilaciones en la coordenada energética que se traducen a la coordenada espacial, mostrada en (c), debido a la correlación que impone el operador de moderación.	64
5.18. Slab de Cobre. Deposición de energía a partir de flujos escalares reconstruidos. Se comparan los valores del algoritmo base y de reconstrucción para las dos aproximaciones del operador CSD: primer orden y segundo orden. El cálculo corresponde a AHOT con 10 mallas y expansión lineal del flujo. En línea continua se muestra la reconstrucción para cada aproximación. El operador de segundo orden provoca oscilaciones en los flujos que se traducen en la deposición de energía puntual, pero que se promedian para dar el resultado correcto de la dosis media por celda (círculos).	65
5.19. Slab de Cobre. Dosis de electrones de 6 MeV. La malla demasiado fina no cumple la condición dada por la Ec. (5.6), por lo que la dosis oscila. Como modo de estabilización se utiliza orden constante cerca de la interface izquierda y orden lineal en el resto del dominio.	65
5.20. Slab de Cobre. Deposición de carga. El orden de desarrollo espacial variable permite estabilizar las oscilaciones.	66
5.21. Dosis de fotones de 4 MeV en agua. El uso de un operador de discretización espacial cuadrático conjuntamente con la malla adaptada generada con el estimador de error permite resolver eficientemente la dosis. En círculos se remarcán las dosis en interfaces de micromallas mostrando la discretización. En este caso se muestra el kerma total.	67

-
- 5.22. *Dosis de electrones de 50 MeV en un target bicapa de berilio (0.9 cm) y tungsteno (0.6 cm). El uso del estimador de error para generar mallas refinadas cerca de las interfaces permite resolver adecuadamente los gradientes del perfil de dosis. En el recuadro se muestra el detalle de la discontinuidad material. 68*
- 5.23. *Espectro de bremsstrahlung generado por electrones de 50 MeV en un target bicapa de berilio (0.9 cm) y tungsteno (0.6 cm). El cálculo se realizó acoplado electrones positrones y fotones. El espectro muestra los pocos característicos de 511 keV y la línea de la capa k del tungsteno (59.2 keV). 68*

Índice de Tablas

4.1. Orden de convergencia del método nodal con núcleo de scattering anisotrópico (P_5). Se compara el orden teórico contra el cálculo tomando como norma la máxima diferencia del flujo escalar medio por micromalla.	43
5.1. <i>Rango CSDA de electrones energéticos en cobre (densidad 8.96 g/cm^3).</i>	52
5.2. <i>Tiempos de cálculo de espectro saliente de fotones. Los casos corresponden a cálculos secuenciales. nps se refiere a la cantidad de historias corridas.</i>	54
5.3. <i>Tiempos de cálculo de perfil de dosis. nps se refiere a la cantidad de historias.</i>	57

Agradecimientos

Al Instituto, por haberme dado la posibilidad de estudiar en un lugar excepcional.

Especialmente a Oscar, por ser una ayuda constante y alegre durante el trabajo.

A Herman, por estar siempre dispuesto a conversar sobre algún tema.

Quiero agradecer a Darío, por haber compartido unos mates y algunas ideas.

A toda la división, por apoyar este trabajo.

A mis compañeros y amigos.

Quiero agradecer sobre todo a mi familia.

Finalmente quiero dar gracias a Dios.